

**ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ, ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР  
ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ, САМАРҚАНД ДАВЛАТ  
УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ  
DSc.27.06.2017. FM./T.34.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

---

**ТОШКЕНТ ДАВЛАТ ТЕХНИКА УНИВЕРСИТЕТИ**

**МАВЛЯНОВ АБДУЛАЗИЗ ШАВКАТОВИЧ**

**КИРИШМА АТОМЛАРИ КЛАСТЕРЛАРИГА ЭГА БЎЛГАН  
КРЕМНИЙ ХОССАЛАРИНИ ТАДҚИҚ ЭТИШ**

**01.04.10 – Яримўтказгичлар физикаси**

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)  
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

**Тошкент – 2018**

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD)  
диссертацияси автореферати мундарижаси**

**Оглавление автореферата диссертации  
доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам**

**Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD) of  
physical-mathematical sciences**

**Мавлянов Абдулазиз Шавкатович**

Киришма атомлари кластерларига эга бўлган кремнийнинг

хоссаларини тадқиқ этиш. . . . . 3

**Мавлянов Абдулазиз Шавкатович**

Исследование свойств кремния с кластерами примесных атомов. . . . . 21

**Mavlyanov Abdulaziz Shavkatovich**

Study of silicon properties with clusters of impurity atoms. . . . . 39

**Эълон қилинган ишлар рўйхати**

Список опубликованных работ

List of published works . . . . . 43

**ФИЗИКА-ТЕХНИКА ИНСТИТУТИ, ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР  
ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ, САМАРҚАНД ДАВЛАТ  
УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ  
DSc.27.06.2017. FM./T.34.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

---

**ТОШКЕНТ ДАВЛАТ ТЕХНИКА УНИВЕРСИТЕТИ**

**МАВЛЯНОВ АБДУЛАЗИЗ ШАВКАТОВИЧ**

**КИРИШМА АТОМЛАРИ КЛАСТЕРЛАРИГА ЭГА БЎЛГАН  
КРЕМНИЙ ХОССАЛАРИНИ ТАДҚИҚ ЭТИШ**

**01.04.10 – Яримўтказгичлар физикаси**

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)  
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

**Тошкент – 2018**

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида В2017.2. PhD/FM37 рақам билан рўйхатга олинган.**

Диссертация Ислон Каримов номидаги Тошкент давлат техника университетида бажарилган.

Диссертация автореферати икки тилда (ўзбек, рус) веб-саҳифанинг: [fti.uz](http://fti.uz) ҳамда «Ziyo Net» ахборот-таълим портали [www.ziyounet.uz](http://www.ziyounet.uz) манзилларига жойлаштирилган.

**Илмий раҳбар:** **Илиев Халмурод Маджитович**  
физика-математика фанлари доктори, профессор

**Расмий оппонентлар:** **Рахматов Аҳмад Зайнидинович**  
техника фанлари доктори, катта илмий ходим

**Матчанов Нурадин Азадович**  
Физика-математика фанлари номзоди, катта илмий ходим

**Етакчи ташкилот:** **Ўзбекистон Миллий Университети**

Диссертация ҳимояси Физика-техника институти, Ион-плазма ва лазер технология-лари институти ва Самарқанд давлат университети ҳузуридаги DSc.27.06.2017.FM./T.34.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2018 йил «\_\_» \_\_\_\_\_ соат \_\_\_\_ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 100084, Тошкент шаҳри, Бодомзор йўли кўчаси, 2Б-уй. Тел./факс: (99871) 235-42-91; e-mail: [info.fti@uzsci.net](mailto:info.fti@uzsci.net), Физика-техника институти мажлислар зали.).

Диссертация билан Физика-техника институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин. ( \_\_ рақам билан рўйхатга олинган.). Манзил: 100084, Тошкент шаҳри, Бодомзор йўли кўчаси, 2Б-уй. Физика-техника институти. Тел./факс: (99871) 235-30-41.

Диссертация автореферати 2018 йил «\_\_» \_\_\_\_\_ да тарқатилди.  
(2018 йил «\_\_» \_\_\_\_\_ даги \_\_\_\_ рақамли реестр баённомаси.)

**С.А. Бахрамов**  
Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш  
раиси ф.-м.ф.д., академик

**А.В. Каримов**  
Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш  
илмий котиби ф.-м.ф.д., профессор

**И.Г. Атабаев**  
Илмий даражалар берувчи Илмий кенгаш  
қошидаги илмий семинар раиси ф.-м.ф.д.,  
профессор

## **КИРИШ (фалсафа доктори(PhD) диссертацияси аннотацияси)**

**Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати.** Бугунги кунда жахон миқёсида жадал ривожланаётган яримўтказгичлар физикаси соҳасида истиқболли йўналишлардан бири киришма атомларга эга кремний асосида ҳажмий моддада мавжуд ҳоссалардан фарқ қилувчи мутлақо бошқа ҳоссаларни намойиш этувчи янги материалларни кашф қилишга алоҳида эътибор қаратилмоқда. Бу борада панжарада жойлашган янги турдаги ячейкали кремний материалнинг истиқболли функционал имкониятларини очилишига ҳамда бу материални микроэлектроникада, материалшуносликда ва бошқа соҳаларда ишлатилишга қаратилган тадқиқотларни олиб бориш муҳим вазифалардан бири бўлиб ҳисобланади.

Ҳозирги кунда дунёда наноўлчамли бирикмаларга эга кремний материални хусусиятларини ўрганишга катта эътибор қаратилмоқда. Бу борада, мақсадли илмий тадқиқотларни жумладан, куйидаги йўналишлардаги илмий изланишларни амалга ошириш муҳим вазифалардан ҳисобланади: энергетик ва тебраниш спектрларини тадқиқот қилиш, янги элементар ячейкали кремнийнинг геометриясини оптималлаштириш, II ва VI гуруҳ элементлари киритилган кремнийнинг хусусиятларини назарий ва амалий тадқиқ қилиш, сонли ҳисоблаш усули ёрдамида аниқланган параметрларни экспериментал йул билан олинган параметрлар билан таққослаш, ва шу асосида янги турдаги материалларни хусусиятларини башорат қилиш.

Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар стратегиясига кўра, илмий-тадқиқот ва инновация фаолиятини рағбатлантириш, илмий ва инновация ютуқларини амалиётга жорий этишнинг самарали механизмларини яратиш масалаларига алоҳида эътибор қаратилмоқда. Жумладан микроэлектроника ва яримўтказгичли асбоблар учун асосий яримўтказгич материали бўлмиш кремнийнинг элементар ячейкасида «кремний-киришма атом» структуралардан таркиб топган янги турдаги яримўтказгичли материалларни олиш технологиясини ривожлантириш масалалари муҳим вазифалардан бири ҳисобланади. Фаол тадбиркорлик, инновацион ғоялар ва технологияларни қўллаб-қувватлаш йилида олинган илмий натижаларни ҳозирги замон талабларига жавоб берадиган даражага олиб чиқиш алоҳида эътиборга сазовор. Бу борада, яримўтказгичли кремний материали асосида кашф қилинган кластер бирикмаларида оптик, фотоэлектрик, электр хусусиятларини чуқур тадқиқ қилиш муҳим аҳамиятга эга. Шу жиҳатдан кластер структурага эга кремний параметрларини сонли ҳисоблаш натижаларини экспериментал натижалар билан таққослаш материалнинг янги хусусиятларини башорат қилиш ва шу асосида яримўтказгичли кремний материални кенг соҳада тадбиқ қилиш муҳим аҳамиятга эга.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги ПФ-4947-сонли «Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар стратегияси тўғрисида»ги Фармони, 2017 йил 13 февралдаги ПҚ–2772 -сон «2017–2021 йилларда электротехника саноатини ривожланти-

ришнинг устувор йўналишлари тўғрисида»ги ва 2017 йил 17 февралдаги ПҚ-2789-сон «Фанлар академияси фаолияти, илмий тадқиқот ишларини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштиришни янада такомиллаштириш чора-тадбирлари тўғрисида»ги Қарорлари ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

**Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланиши устувор йўналишларига мослиги.** Мазкур тадқиқот республика фан ва технологиялар ривожланишининг III. «Энергетика, энергоресурс тежамкорлиги, транспорт, машина ва асбобсозлик, замонавий электроника, микроэлектроника, фотоника ва электрон асбобсозлиги ривожланиши»нинг устувор йўналишига доир бажарилган.

**Муаммонинг ўрганилганлик даражаси.** Л.И. Овсянникова томонидан 6-31G базасида Хартри-Фокни *ab initio* усули билан бир қатор яримўтказгичли кластерларнинг мақбуллаштирилган конфигурацияси, электрон структураси, заряд кўчиши, тақиқланган тирқиш, тўлиқ энергия, когезия энергияси, электрон зичлик ҳаритаси, ИҚ ва раман спектрлари ва уларга мос келувчи хусусий акустик тебранишларининг модалари ҳисобланган.

Ҳозирги кунда Ўзбекистонда диффузион технологияни ривожланишига академик М.С. Саидов мактаби маълум ҳисса қўшдилар, жумладан профессор И.Г.Атабаев ва Н.А. Матчановлар томонидан кремний-германий қотишмаларда киришмаларнинг паст ҳароратли диффузия жараёнлари мукамаллаштирилган<sup>1</sup>, ҳамда техника фанлари доктори А.З. Рахматов томонидан диффузион технологиянинг янги кассетали диффузия усули таклиф қилинган бўлиб, ишлаб чиқариш тармоғида параметрлари оптималлаштирилган юқори қувватли диодлар олишда жорий қилинган<sup>2</sup>.

Академиклар М.К. Бахадирханов ва А.Т. Мамадалимовлар ва уларнинг ходимлари томонидан S, Se, Mn ва бошқа киришма атомлар билан легирланган кластерли кремнийда янги фотоэлектрик, магнит ва оптик ходисалар кузатилган. Шу билан бирга, Р.А. Мўминов ва унинг шогирдлари томонидан кремнийда мултиэкситон генерацияси механизмлари аниқланган.

Бироқ кластерларни атом структуралари, хусусан кремнийда тажрибавий тадқиқотлар жуда қийин вазифа ҳисобланади. Кластерларни электрон хусусиятлари ва геометрик параметрларини ўзаро боғлиқлик масалалари ечилмай қолмоқда<sup>3</sup>.

**Тадқиқотнинг диссертация бажарилган олий таълим муассасасидаги илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги.**

<sup>1</sup> И.Г. Атабаев, Н.А. Матчанов и др. Низкотемпературная диффузия лития в твердые растворы кремний-германий ФТТ, 2001, В.12, С. 2140-2143.

<sup>2</sup> Патент РУз № 5328. Способ изготовления кремниевых ограничителей напряжения / Муратов А.Ф., Рахматов А.З., Меркулов А.А., Исмоилов И.Р. // Бюллетень № 3 от 30.09.1994 г.

<sup>3</sup> Н.А. Борщ ва бошқ. Теоретическое исследование атомной структуры и электронно-энергетического спектра кремниевых нанокластеров. Тез. Докл. VII М. конф. «КРЕМНИЙ–2010». Н. Новгород, С.131-132.

Диссертация Тошкент давлат техника университети илмий тадқиқот режасининг «Яримўтказгичларда киришма атомларни ўз-ўзидан ташкил қилиш механизмини тадқиқ қилиш ва уларни параметрларини бошқариш» (2012-2016) ва №МК-37/2012 - сонли «Нановаризон структурага эга бўлган кремний асосида кенг спектрал сезгирликга ( $0,1 \div 3$  мкм) эга бўлган тубдан янги фотоэлементларни ишлаб чиқиш ва тайёрлаш» (Ўзбекистон-Туркманистон 2013-2015), ҳамда ПФИ ФА-ФЗ-004 лойиҳаси «Самарадорлиги юқори бўлган, арзон фотоўзгартиргичларни шакллантириш учун фундаментал янги физик моделлар, механизмлар, усулларни, шунингдек улар асосидаги узок вақт ишлайдиган фотоэнергетик қурилмани тадқиқ этиш», (Ўзбекистон Республикаси ФА «Физика-Қуёш» ИИЧБ ФТИ)» (2017-2020) лойиҳалари доирасида бажарилган.

**Тадқиқотнинг мақсади.**  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  (кремний икки-марганец икки-олтингугурт) ячейкасига эга бўлган кластер структура параметрларини сонли ҳисоблаш ва Mn ҳамда S билан легирланган монокристалл кремнийнинг фотоэлектрик хусусиятларини тадқиқ этишдан иборат.

**Тадқиқотнинг вазифалари:**

кремнийни S билан емиришсиз диффузион легирлашнинг ҳамда кейинчалик Mn ни диффузия қилган ҳолда Si атомларининг иштирокида  $\text{MnS}$  бирикмасини шаклланишини таъминлайдиган оптимал режимларини аниқлаш;

олтингугурт, марганец атомлари ҳамда марганец ва олтингугурт комплексларига эга бўлган турли кремний намуналарини фотоэлектрик хусусиятларини ўрганиш;

$\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  ячейкаларини электрон ҳолатларини атомлар сони (нисбатан унча катта бўлмаган (87 атом) ва уларнинг кластердаги структуравий ҳолатига боғлиқ равишда *ab initio* квант-механик ва яримэмпирик усуллар билан ҳисоблашларни бажариш;

$\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  ячейкалар ҳолатларининг сонли ҳисоблаш натижаларини тажриба маълумотлари билан қиёсий таҳлилни амалга ошириш.

**Тадқиқотнинг объекти** КДБ-1 (солиштирама қаршилиги  $\rho = 1$  Ом·см) маркали *p*-турдаги монокристалл кремний намуналари ва  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  ячейка ташкил қилувчи структурадан иборат.

**Тадқиқотнинг предмети**  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  ячейкаларга эга бўлган кластерларни ҳосил бўлиш қонунияти, S ва Mn билан легирланган кремнийнинг фотоэлектрик хусусиятлари ва сонли ҳисоблаш натижаларини экспериментал натижалар билан таққослашдан иборат.

**Тадқиқотнинг усуллари.** Тадқиқотда экспериментал физиканинг ахборотли мажмуасидан фойдаланилган: *p-n*-ўтишга эга бўлган структураларни ўлчашниг вольтампер, фотоэлектр усуллари; ИҚ-тебранишли спектроскопия, шунингдек квант-механик ва яримэмпирик усуллар билан *ab initio* сонли ҳисоблашлар қўлланилган.

**Тадқиқотнинг илмий янгилиги** қуйидагилардан иборат:

юқори ҳароратда олтингугурт билан легирланган юзасида емирилиш тўлиқ йўқотилган кремний монокристал намуналари олинган;

S га эга бўлган монокристалл кремний намунасида ионизация сатҳлари, фотоўтказувчанликни инфрақизил сўндириш (ФЎИҚС) ва тўғри уланилган ҳолатда манфий фотоўтказувчанлик аниқланган;

Mn ва S билан легирланган КДБ-1да  $T=123K$  ва  $T=198K$  ҳароратларда олтингугурт ҳамда марганец билан боғлиқ бўлган чуқур сатҳларининг қайта зарядланиши билан боғлиқ заряд ташувчилари ишорасининг ўзгариш эффекти топилган;

Mn ва S га эга бўлган монокристалл кремний намунасидаги қисқа туташув токи зичлиги ва салт кучланишининг қийматларида ИҚ-ташқил қилувчининг ҳам салмоқли ҳиссаси мавжуд бўлиши аниқланган;

$Si_2Mn_2S$  ячейкаларга эга бўлган структуранинг тўлиқ энергияси, инфрақизил тебранма ва электрон спектрлари ҳамда электронларнинг жойлашув тартиби ҳисоблаб чиқилган;

$Si_2Mn_2S$  ячейкаларга эга бўлган кластерли структуранинг тебранишлар модаси, тақиқланган зонаси тирқиш ўлчамининг қиймати Mn ва S билан легирланган намуналарнинг тебраниш спектри ва фотоўтказувчанлиги бўйича олинган тажрибавий қийматлари билан етарлича мос келиши аниқланган;

#### **Тадқиқотнинг амалий натижалари қуйидагилардан иборат:**

Ишлаб чиқилган сонли ҳисоблаш усули, фотоэлектрик ўлчашлар натижалари билан биргаликда II ва VI гуруҳ элементларининг киришма атомларига эга бўлган кремний асосида фотоэлементларнинг янги авлодини ишлаб чиқишда қўллаш мумкин.

**Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги** бир бирига боғлиқ бўлмаган маълумотларни ўлчаш ва ишлов бериш усулларининг мажмуасидан фойдаланилганлиги, шунингдек уларни яримўтказгичлар физикаси ва техникасини замонавий тушунчаларига мослиги билан таъминланган.

**Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.** Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти, кластерларни атом ва электрон-энергетик хусусиятлари тўғрисидаги тасаввурларни кенгайтириш имконини беради.

Тадқиқот натижасининг амалий аҳамияти киришма атомларнинг кластерига эга бўлган яримўтказгичларнинг хоссаси ва киришма атомларнинг кластери киритилган яримўтказгичлар асосида янги асбобларни, хусусан сезгирликнинг спектрал соҳаси кенгайтирилган фотоқабулқилгичлар ишлаб чиқишда қўллаш мумкин.

**Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши.**  $Si_2Mn_2S$  ячейкасига эга бўлган структура параметрларини сонли ҳисоблаш ва Mn ҳамда S билан легирланган монокристалл кремнийнинг фотоэлектрик параметрларининг хусусийлигини очиш асосида:

кремнийни II ва VI группа элементлари билан лигерлаш режимлари «Trasporte Mono-y Bipolar en Estructuras Semiconductors» мавзусидаги Мексика инновациялар марказининг лойиҳасини бажаришда коррозиясиз яримўтказгичли структуралар олишда қўлланилган (Мексика инновациялар марказининг 2017 йил 5 декабрдаги маълумотномаси). Илмий натижанинг



қўлланиши яримўтказгичли нанокластерли фотосезгир структураларнинг спектрал диапазонини кенгайтириш имконини берган;

кремнийни бир нечта босқичда ҳароратни аста секин ошириш йўли билан емиришсиз диффузили легирлашнинг технологик жараёнлари «FOTON» акциядорлик жамиятида яримўтказгичли асбоблар ишлаб чиқишда қўлланилган («Ўзэлтехсаноат» акциядорлик компаниясининг 2017 йил 6 октябрдаги 02-2075-сон маълумотномаси). Илмий натижадан фойдаланиш яримўтказгичли асбобларнинг юзасини емиришсиз ҳолатда тенг тақсимланган легирлашни таъминлашга имкон берган;

кўп босқичли паст ҳароратда диффузия ўтказгандан сўнг намунани тезда совутиш йўли билан киришма атомларни кремний монокристаллида тегишли чуқурликда *p-n*-ўтишли диод структура ҳосил қилиш усулидан ЁА-ФА-Ф004-рақамли «Катта диаметрли монокристалл кремний асосида икки координатали сезгир детекторни шакллантириш ва тайёрлаш технологиясини ишлаб чиқиш» мавзусидаги лойиҳани бажариш жараёнида фойдаланилган (Ўзбекистон Республикаси Фан ва технологиялар агентлигининг 2017 йил 4 декабрдаги ФТА-02-11/1247-сон маълумотномаси). Илмий натижалардан фойдаланиш кремнийда диффузия чуқурлигини бир хиллигини таъминлашга имкон берган.

**Диссертация ишининг натижалари** 9 та ҳалқаро ва 4 та республика миқёсидаги конференцияларда маъруза қилинган ва муҳокамадан ўтказилган.

**Тадқиқот натижаларининг эълон қилинганлиги.** Диссертация мавзуси бўйича жами 21 та илмий иш чоп этилган, шулардан 8 та мақола Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг докторлик диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган журналларда чоп этилган.

**Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми.** Диссертация таркиби кириш, тўртта боб, хулоса, илова, фойдаланилган адабиётлар рўйхатидан иборат. Диссертациянинг матни 115 бетда келтирилган.

## ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

**Кириш** қисмида тадқиқотларнинг долзарблиги ва диссертация ишини мавзуси асосланган, тадқиқотнинг мақсади ва вазифалари белгилаб берилган, тадқиқотнинг илмий янгилиги ва амалий натижалари баён қилинган, тадқиқот натижаларининг амалиётга жорий қилиниши ва апробацияси, ҳамда диссертация хажми ва тузилиши бўйича маълумотлар келтирилган.

Диссертациянинг «**Кластер структураларига эга бўлган кремний ҳоссаларини бошқариш муаммолари ва ҳолатлари**» деб номланган биринчи бобида яримўтказгичли кремний ҳоссаларини унда кластерларни шакллантириш усуллари орқали ўзгартириш йўналишлари ҳолатига оид адабиётлар таҳлили келтирилган. Шунингдек, кремний матрицаси ва нанокластерлар ўртасида ўзаро таъсир билан боғлиқ бўлган нозик ҳусусиятларни ўрганишга оид адабиётлар таҳлили келтирилган. Мавжуд бўлган назарий ва амалий маълумотлар таҳлили асосида аниқ йўналиш белгиланган, диссертацияни мақсад ва вазифалари аниқланган.

Диссертациянинг «**Кремнийда киришмавий атомлар диффузияси механизмлари. Ҳусусий нуктавий дефектлар ва уларни легирловчи киришмалар билан ўзаро таъсири**» деб номланган иккинчи бобида кристалл кремнийда кенг илмий оммада диффузия жараёни тўғрисидаги тарқалган тушунчадан келиб чиққан ҳолда, диффузия жараёнини назарияси ва тегишли концепцияси келтирилган. Киришмавий ва туб атомлар диффузия механизмлари кўриб чиқилган. Дефектларни ўрни ва уларни киришмалар билан ўзаро таъсири баён қилинган.

Киришмавий яримўтказгичларда диффузия жараёни ҳусусий яримўтказгичлардан фарқли равишда тезроқ содир бўлиши аниқланган, биринчидан: Ферми сатҳини кўтарилиши, яъни  $n/n_i$  га таъсир қилиши натижасида, иккинчидан: электр майдони сабабли  $h$  диффузия тезлашиш коэффициенти туфайли.

Селен ва теллур билан легирлаш жараёнида пластина юзасида емирилиш ҳолати учрайди. Бу киришмаларни кремнийга оптимал диффузия қилиш режимлари аниқланган. Олди сурилган легирлаш усулини асосий мазмуни шундан иборатки, жараён диффузия ҳароратини аста секинлик билан ошириш усули билан бир неча босқичда амалга оширилади. Ҳароратни ҳар бир босқич учун ушлаб туриш даврийлиги шундай бошқариладики, диффузонт буғларини кварц ампула ичидаги босими аста секин ортади ва у 0,5 атм босимдан ошмайди, бу эса кремний кристалли юзасида емирилишни тўлиқ йўқотиш имконини беради.

Таклиф қилинаётган усулда икки томондан сайқаланган  $10 \times 4 \times 1$  мм<sup>3</sup> ўлчамга эга бўлган кремний намуналари ва селенни белгиланган миқдори диаметри 10 мм ва узунлиги 76 мм бўлган цилиндр шаклидаги кварц ампулалари ичига жойлаштирилади. Кварц деворларининг қалинлиги 1 мм ни ташкил қилади. Ампулалар ҳаво  $10^{-5}$  мм см.уст.гача сўриб олинади ва ампулалар пайвандлаб қўйилади. Шундан кейин ампулалар горизонтал печкани ишчи соҳасига хона ҳароратидан бошлаб жойлаштирилади.

Кремнийга S ва Se киришмаларини диффузия қилиш алоҳида кварц ампулаларида 1150÷1250<sup>0</sup>С ҳарорат оралиғида 10 ÷18 соат мобайнида амалга оширилади. Бир вақтни узида Se ва S киришмаларини кремнийга диффузияси одатдаги технология бўйича ҳам амалга оширилади. Бу жараён иккала технология асосида олинган кремний намуналари параметрларини солиштириш мақсадида амалга оширилади.

Таҷриба натижалари шуни кўрсатдики, янги технология бўйича легирланиб олинган намуналарда кристал юзасида емирилиш содир бўлмади. Одатдаги усул бўйича легирланган намуналарда эса 150÷200 мкм чуқурликгача сезиларли емирилиш ҳолати кузатилган.

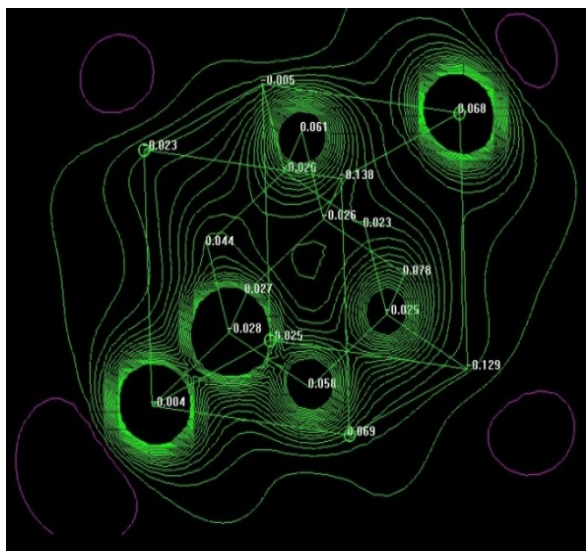
Янги технология асосида VI гуруҳ элементлари билан легирланган кремнийни электр ва галваноманит хоссаларини тадқиқ қилиш натижасида одатдаги технология бўйича легирланган намуналарга қараганда бу намуналарда электр фаол атомларни сони деярли 2÷2,5 баробар ошиши аниқланди. Юқоридаги киришмаларни кремнийда диффузия жараёни сезиларли тезлашиши (деярли 3÷4 марта) ҳам аниқланди.

Диффузия масофаси  $x = \sqrt{2Dt}$  формуласи билан аниқланди. Диффузия коэффициенти эса ҳар бир киришма учун  $D = D_0 \exp(-E_a/kT)$  формуласи орқали аниқланди. Бу ерда  $D_0$  – олди экспоненциал купайтиргич ва  $E_a$  – ҳар бир киришма учун диффузия жараёни активация энергияси (маълумотлар тўпламидан олинган). Кремнийни VI гуруҳ киришмалари билан легирлашни янги мукаммаллаштирилган технологияси диффузия жараёнида кристал юзасида емирилишни тўлиқ йўқотишни таъминлайди, электрофаол атомларнинг концентрациясини оширади. Шунингдек, бу киришмаларни кремнийга киритишни сезиларли даражада тезлаштириш имконини беради.

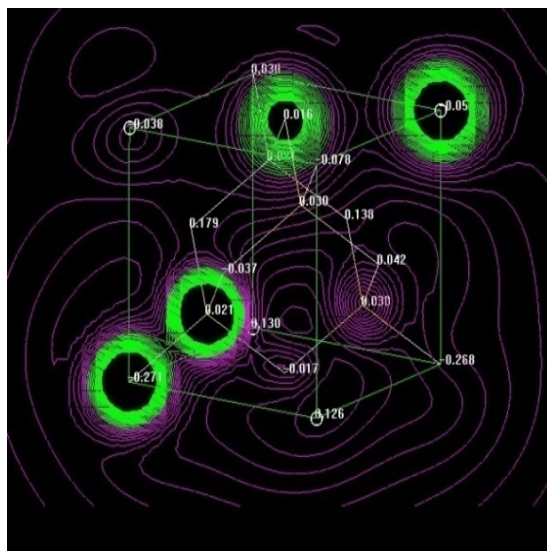
Диссертациянинг «**Si<sub>2</sub>Mn<sub>2</sub>S** ячейкали кремний панжарасини параметрик сонли моделлаштириш» деб номланган учинчи бобида олмос структурали Si панжараси тугунларида S ва Mn киришмавий атомлар гипотетик жойлашиб, Si<sub>2</sub>Mn<sub>2</sub>S-турдаги тетраэдрик ячейкаларни ҳосил қилган ҳолатидаги параметрларини сонли ҳисоблаш натижалари келтирилган.

Мавжуд квант-кимёвий ва молекуляр-динамик ҳисобдан фойдаланиб, куб ичидаги тўғри тетраэдр чўкқиларида тўртта атом жойлашиб Si атомини ўраб турган тугун ва шунингдек олмос туридаги кристал панжара структураси тузилган. Si учун панжарани тегишли  $a = 5,43095 \text{ \AA}$ ,  $d(A-B) = 2,35167 \text{ \AA}$  и  $d(A-A) = 33,84026 \text{ \AA}$  параметрлари белгиланган.

Атом кластерларининг электрон хусусиятларини сонли ҳисоблаш ва ўрганиш учун ab initio квант-механик, хусусан чекланган ва чекланмаган Хартри-Фок (RHF/UHF), электрон зичлиги функционали (DFT) ва яримэмпирик, хусусан ZINDO-S, усуллари қўлланилган. Яримэмпирик квант-кимёвий усул билан Si базавий панжараси (1 ва 2 а)- расм) ва учта Si<sub>2</sub>Mn<sub>2</sub>S-турдаги тетраэдрик тугунлардан иборат кремний панжараси (1 ва 2б) - расм)



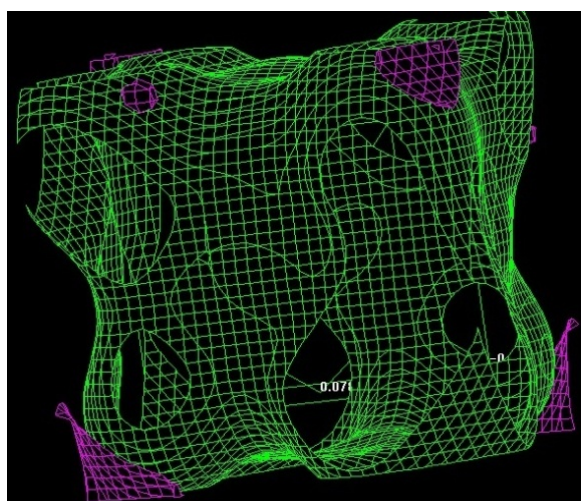
а) Si базавий панжара



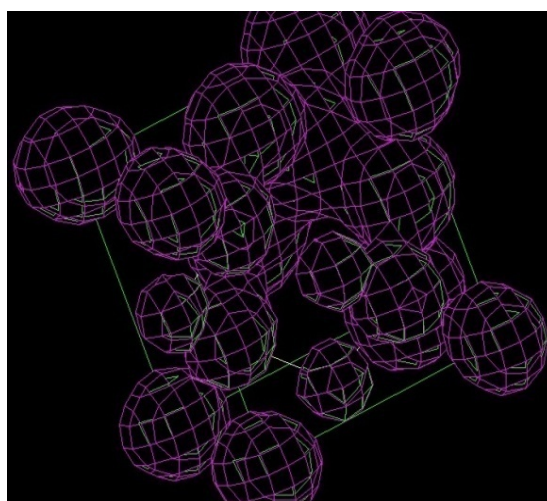
б) Si<sub>2</sub>Mn<sub>2</sub>S ячейкали Si панжараси

**1-расм. Панжаранинг заряд ҳолати**

учун электростатик потенциал харитаси ҳисоблаб чиқилган. Кучли ионлик мавжудлиги туфайли ион боғи ҳиссасини сезиларли кўпайиши ва ковалент боғи ҳиссаси камайишинини кузатса бўлади.



а) Si базавий панжара



б) Si<sub>2</sub>Mn<sub>2</sub>S ячейкали Si панжараси

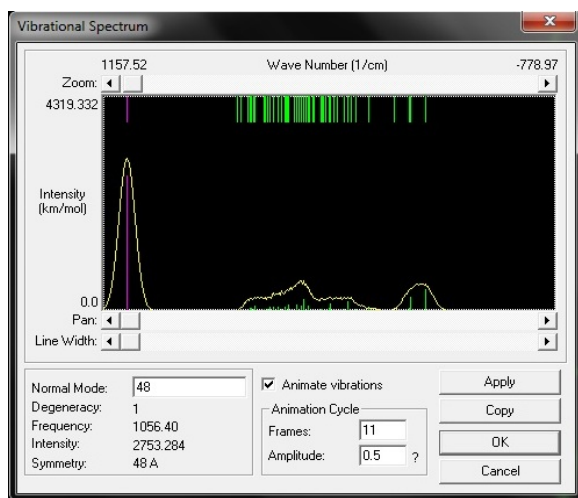
**2- расм. Панжаранинг электростатик потенциали 3D тасвири**

Спектрларни ҳисоблашдан олдин opt режимида мувозанатли конфигурацияни излаш амалга оширилди. Оптимизация режимидан олдин умумий энергия  $E_{\text{умум}} = -77436,6$  ккал/мол ни ташкил этди. Оптимизация Полак-Рибери (ўзаро боғланган градиентлар) усули ёрдамида амалга оширилди.

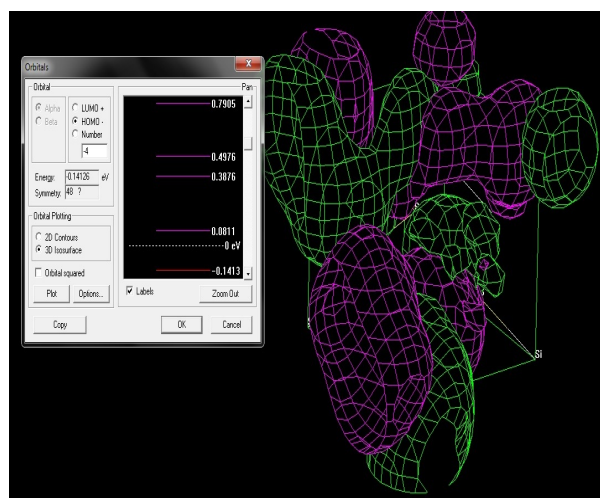
Si<sub>2</sub>Mn<sub>2</sub>S кластерини ҳисоблаш жараёнида, масалан, йигирма тўлиқ циклдан сўнг умумий энергия ўзгарди ва  $E_{\text{умум}} = 79405,1$  ккал/мол ни ташкил этди. Полак-Рибери (ўзаро боғланган градиентлар) усули ёрдамида ўтказилган геометрия оптимизацияси натижасида 20 тўлиқ цикл ва 50 итерациядан сўнг структура тўғри геометрик шаклдан озроқ узоклашади. Шу сабадан кейинги

ҳисоблар учун биз минимал энергияга эга бўлган тўғри геометрик шаклга эга конфигурацияни танлаб олдик.

Тебранма спектр ва молекуляр орбиталларни (МО) ҳисоблаш учун ZINDO-S яримэмпирик усулидан фойдаланилди. 3-расмда  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  ячейкали структурани инфрақизил (ИК) тебранма ҳаракати спектри таҳлили келтирилган. Унда  $1056.40 \text{ см}^{-1}$  қийматга эга бўлган мода аниқланган. Электронлар ҳолатларини моделлаштириш ўтказилган, шунингдек  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  кластери молекуляр орбиталини электрон зичлиги ҳаритаси қурилган (4-расм). Ҳарита юқори эгалланган НОМО = 0,1431 эВ ва қуйи эгалланмаган ЛОМО = 0,0811 эВ орбиталлар кўрсатилган контур юзалар шаклида тасвирланган.



**3-расм.  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  ячейкасининг ИК –спектри тебранма модлари**



**4-расм.  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  ячейкалари МО электрон зичлиги**

Электрон спектрни ҳисоблаш учун спин билан чегараланмаган (қобик билан қопланган ёпиқ тизимлар учун) 6-31G базисга эга Хартри-Фок (UNF) усули танланди. Дастлабки тест ҳисоблаш натижалари шуни кўрсатдики, бу усул ярим эмпирик усулга қараганда бир томондан бир неча мартаба аниқроқ ҳисобланса (хусусан MNDO), бошқа томондан DFT усулига қараганда ҳисоблаш вақти бўйича бир неча марта тезроқ. Шунингдек таъкидлаш жоизки DFT усули ab-initio усулидан аниқлиги фақат бир неча фоизга юқорироқ<sup>4</sup>.

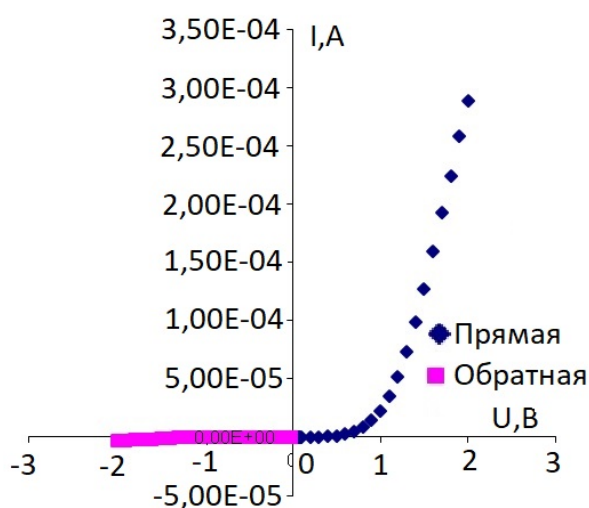
Юқоридаги шкала барча ғалаёнланган электрон ҳолатларини ифодалайди, қуйи шкалада эса фақат спектроскопдаги 467.75 нм, 517 нм, 543 нм, 602 нм, 688 нм, 1227 нм га оид ютилиш пиклари шунингдек, уларни нисбий интенсивлик ҳолати кўрсатилади.

Диссертациянинг «**Таркибида Mn ва S киришма атомлари бўлган кремнийни электр, фотоэлектрик ва оптик хусусиятлари**» деб номланган тўртинчи бобида S, Mn ва MnS билан легирланган кремний наъмуналарини фотоэлектрик ва электр ўлчаш натижалари келтирилган. Юқорида таъкидлаб

<sup>4</sup> Frank Jensen. Introduction to Computational Chemistry, Second Ed. 2007 John Wiley & Sons, Ltd. P.133-204.

ўтилган турли тажрибалар ва параметрик ҳисоблашдан олинган натижалар орасида ўзаро боғлиқликни таҳлил қилишга ўриниб кўрилган.

Электр ва фотоэлектрик тадқиқотлар объекти сифатида Mn ва S киришма атомлари билан легирланган Si намуналари танланган. Тадқиқот иши давомида 1мм ва 0,79 мм қалинликга эга p-Si (КДБ-1) пластина намуналари фойдаланилган. Олтингугурт ва марганец билан легирлаш вакуумланган ( $10^{-4}$  мм см.уст.) кварц ампулаларида диффузия йўли билан  $1260^{\circ}\text{C}$  ва  $1200^{\circ}\text{C}$  ҳароратларда амалга оширилган. Вақт давомийлиги легирлашни бир маромда таъминлашдан келиб чиққан ҳолда белгиланган.



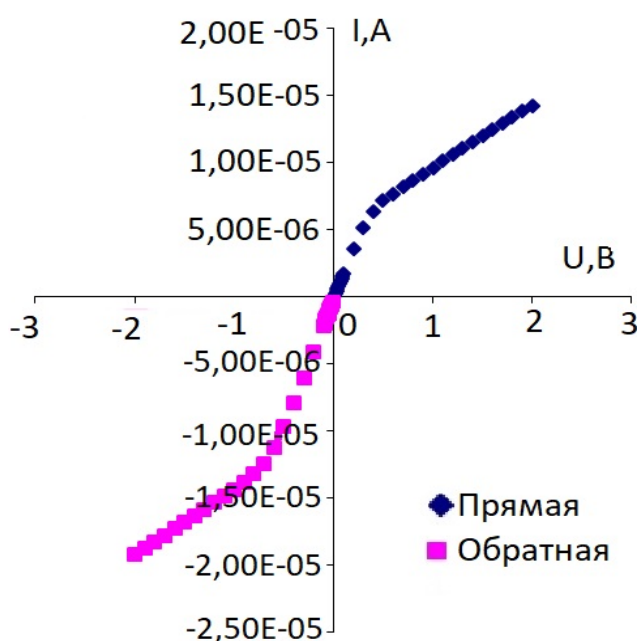
5-расм. Si<S> намунасидаги қоронғи ҳолатдаги ВАХ (КДБ-1)

5-расмда кўрсатилган S билан легирланган кремний асосидаги *p-n* структурани қоронғилакдаги вольт-ампер характеристикаси (ВАХ) симметрик бўлмаган кўринишга эга. Ток, тўғри силжиш соҳасида берилаётган кучланишни ортиб бориши билан кучли экспоненциал шаклда ошади, тескари силжиш соҳасида эса ток киймати кучланишга боғлиқ бўлмайди.

Классик Шоттки тўсиғи каби иккала ҳолатда ҳам (тўғри ва тескари

силжиш), ток асосий заряд ташувчилар - электронлар орқали оширилади. Бунга сабаб – икки ҳолатда ҳам уларда рекомбинацион ва диффузион жараёнлар мавжуд эмас. Si<Mn> структурага эга бўлган (КДБ-3) намунани вольт-ампер характеристикасини тадқиқ қилганимизда *p+n* структурада қоронғиликда тескари ток ўзгаришини экстремал характери кузатилди, 6-расм. 6-расмдан кўриниб турибдики, тескари токни ўзгариши экстремал характерга эга. Тескари силжишдаги ушбу ҳодисани ҳажмий заряд соҳасида жуда кичик ўтказувчанликга эга бўлган бўшлиқни мавжудлиги билан тушунтирса бўлади. Қатламни ўтказувчанлиги унга ток ташувчиларини инжекция қилиш йўли билан кенг доираларда ўзгартирилиши мумкин, чунки қатламни ўзининг ҳусусий заряд ташувчиларини концентрацияси жуда оз бўлганлиги сабабли, қатлам ўтказувчанлиги асосан инжекция йули билан киритилган заряд ташувчилар концентрацияси билан аниқланади. Контактлар орасида потенциаллар фарқи ҳосил қилинганда электр токи пайдо бўлади. Тахмин қилишимизча, қатламда кўп миқдорда кластерлар ва киришмалар мавжуд ва уларда инжекцияланган ташувчиларни сочилишига асосий сабабчи. Шунга ўхшаш эффект мазкур китобда келтирилган<sup>5</sup>.

<sup>5</sup> Г.И. Епифанов. Физические основы микроэлектроники. М.: Книга по Требованию, 2012. С. 356-360.



6-расм. Si<B,Mn> намунасидаги қоронғи ҳолатдаги ВАХ (КДБ-3)

Si<B,Mn> нинг тақиқланган соҳасида кўп сонга эга локал сатҳлар мавжуд, улар эркин ток ташувчиларни ушлаб қолади. Тузоқлар томонидан тутиб қолинган инжекцияланган ташувчилар ўзгармас ҳажмий зарядини ҳосил қилади ва структурани ўтказувчанлигида иштирок этмайдилар.  $n^+ - p^+$  структурагини ўтказувчанлиги фақат тузоқ томонидан тутиб қолинмаган инжекцияланган эркин ташувчилар концентрацияси билан аниқланади. Бундан ташқари бу ташувчилар компенсация бўлмаган ҳажмий зарядини ҳосил қилади.

Тузоқлар томонидан ушлаб қолинган ташувчилар ва қатламга инжекцияланган эркин ташувчиларнинг ҳажмий заряди тескари йўналишдаги токни ўтиш қонуниятини ифодалайди. Амалда бундай ток ҳажмий заряд томонидан чекланган бўлади<sup>6</sup>.

Si<sub>2</sub>Mn<sub>2</sub>S ячейкали структуранинг ИҚ-тебранма спектрида энг юқори тебраниш модалари, жумладан, 1056.40 см<sup>-1</sup> қийматга эга (сонли ҳисоблаш натижаси) мода аниқланди. FT IR Nicolet iS50Si қурилма ёрдамида <Mn,S> намунасида олинган ИҚ-тебранма спектри 2500÷500 оралиғида 1125,28 см<sup>-1</sup>, 919,41 см<sup>-1</sup>, 871,68 см<sup>-1</sup> ва жумладан, энг юқори қиймати 1011.50 см<sup>-1</sup> эга бўлган модалар аниқланди (7-расм). FT IR Nicolet iS50 қурилмасида олинган Si<Mn,S> намунаси тебранма спектри (мода 1011,50 см<sup>-1</sup>) ва параметрик сонли ҳисоблаш натижасида олинган Si<sub>2</sub>Mn<sub>2</sub>S ячейкали кремний панжараси ИҚ-тебранма спектри (мода 1056.40 см<sup>-1</sup>) ўртасида яқин ўхшашлик мавжуд.

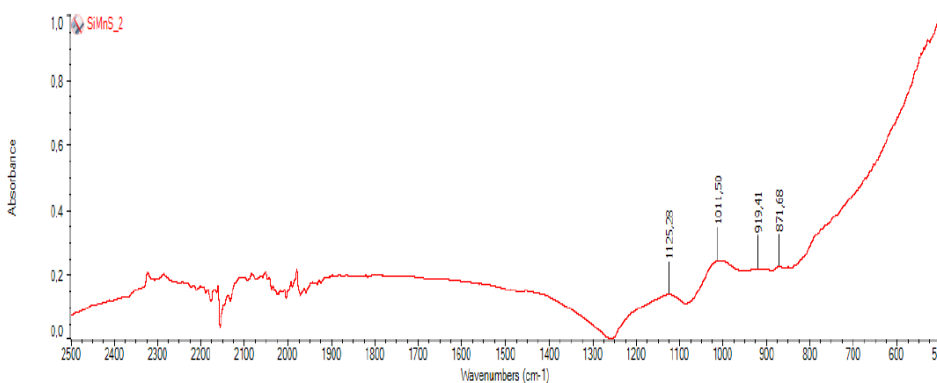
Si<Mn,S> (илк КДБ-3) намунасини ҳароратга боғлиқ ўтказувчанлигини ўлчаш жараёнида унда  $E_1 = 0,561$  эВ ва  $E_2 = 0,163$  эВ сатҳлар аниқланди. Мақолага<sup>6</sup> кўра,  $E_2 = 0,163$  эВ сатҳи Mn<sup>+3</sup> ионларини Mn<sup>+4</sup> ионларига ўтишига хосдир.  $E_1 = 0,561$  эВ сатҳи эҳтимол SiMnS кластерига тегишли деб тахмин қилиш мумкин, чунки Si<Mn> ва S<S> намуналарида ушбу сатҳ борлиги аниқланмаган.

Si<Mn,S> намуналарида салт кучланиш ва қисқа туташув токи қийматлари ўлчанилган. Намуналарда T=300K ҳароратда ИҚ-оралиғида сезиларли ошиш (~ 30% гача) кузатилди. Si<S> ва Si<Mn> намуналарида T=300K ҳароратда бу ўсиш мос равишда ~ 23.5% ва ~ 3.3% ташкил қилди.

<sup>6</sup>Гнатченко С.Л., Давиденко И.И., Давиденко Н.А., Девин Дж.М. Особенности электро-и фотопроводимости марганцево-германиевых гранатов. ФТТ. Санкт-Петербург, 2002. Т. 44, Вып.1. С. 87-92.

## Find peaks results

Region	Peak	Height
1	871,68	0,22
1	919,41	0,22
1	1011,50	0,24
1	1125,28	0,13



**7-расм. FT IR Nicolet iS50Si қурилма ёрдамида <Mn,S> намунасида 2500÷500 оралиғида олинган интенсив модалар 1125,28 см<sup>-1</sup>, 1011,50см<sup>-1</sup>, 919,41 см<sup>-1</sup> и 871,68 см<sup>-1</sup>га тенг ИҚ-тебранма спектри**

Ўлчаш учун оптик дарчага эга бўлган криостат, чўғланма лампани таъминот манбаи (Куёш иммитатори қурилмаси) ва ёруғлик нури филтридан фойдаланилган. Чўғланма лампани нури объектив ёрдамида криостатнинг дарчасига фокусланган. Ундан сўнг ёруғлик нури ИКС-1 ултрабинафша ва кўринадиган спектрларни тадқиқ қилинаётган спектрал интервалда (300÷750 нм) кесиб ташлайдиган филтр орқали намунага тушурилган. 1-жадвалда Si<Mn,S> намунасининг қоронғи ва ёруғлик токи  $i_k$ ,  $i_{ii}$  шунингдек кучланиши қийматлари ҳарорат  $T=77K\div 300K$  оралиғида келтирилган.

Қоронғи ва ёруғликдаги қисқа туташув токи  $i_k$  ва шунингдек кучланишни ўлчаш натижасида аниқланган заряд ташувчиларининг ҳажмий заряд доирасида  $T = 198K$  ва  $123K$  ҳароратларда қиймати ўзгариш эффекти эҳтимол олтингугурт ва марганец билан боғлиқ бўлган чуқур сатҳларни қайта ишора ўзгариши билан боғлиқдир.

Mn ва S билан легирланган кремний намунасида фотоўтказувчанлик (ФЎ) ҳолатини ҳароратни кенг кўламида ( $T = 77\div 350 K$ ) ўрганиш имконини берувчи, криостат билан таъминланган ИКС-21 спектрометри ёрдамида ўрганилди. Бу тадқиқотлар сатҳларни аниқлаш ва фотоўтказувчанликни инфрақизил сўндириш (ФЎИҚС) ҳодисасини кузатиш учун олиб борилди. Киришмавий ФЎни ўрганиш учун ИКС-21 дарчаси олдида ва глобардан кейин ўрнатилинган сайқалланган монокристаллик кремний пластинасида ишланган кўшалок филтр ишлатилди.



**1-жадвал.**

Si<Mn,S> намунасининг қоронғи ва ёритилган ҳолатдаги токи  $i_k, i_y$  шунингдек кучланиши қийматлари  $T=77K\div 300K$  ҳарорат оралиғидаги (илк КДБ-1  $\rho = 1 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ).

Қоронғи $U, \text{ мВ}$	Ёритилган $U, \text{ мВ}$	$U, \text{ мВ}$ филтр	Қоронғи, $I, \text{ А}$	Ёритилган $m., I, \text{ А}$	Филтр, $I, \text{ А}$	$T, \text{ К}$
3,3	156	55,4	$7,7\cdot 10^{-7}$	$1,3\cdot 10^{-4}$	$1,2\cdot 10^{-5}$	300 К
1,5	342	47,6	$3,2\cdot 10^{-8}$	$1,2\cdot 10^{-4}$	$1,7\cdot 10^{-6}$	223 К
1,7	319	34	$8,3\cdot 10^{-8}$	$7\cdot 10^{-5}$	$1,7\cdot 10^{-6}$	203 К
0,1	-25,6	-1,4	$1\cdot 10^{-9}$	$-2,2\cdot 10^{-8}$	$-2,9\cdot 10^{-9}$	198 К
-30,2	53,8	16,1	$-6,2\cdot 10^{-8}$	$1,3\cdot 10^{-5}$	$5\cdot 10^{-9}$	123 К
3,2	113	1,9	$2,2\cdot 10^{-9}$	$3,6\cdot 10^{-7}$	$1,6\cdot 10^{-8}$	121 К

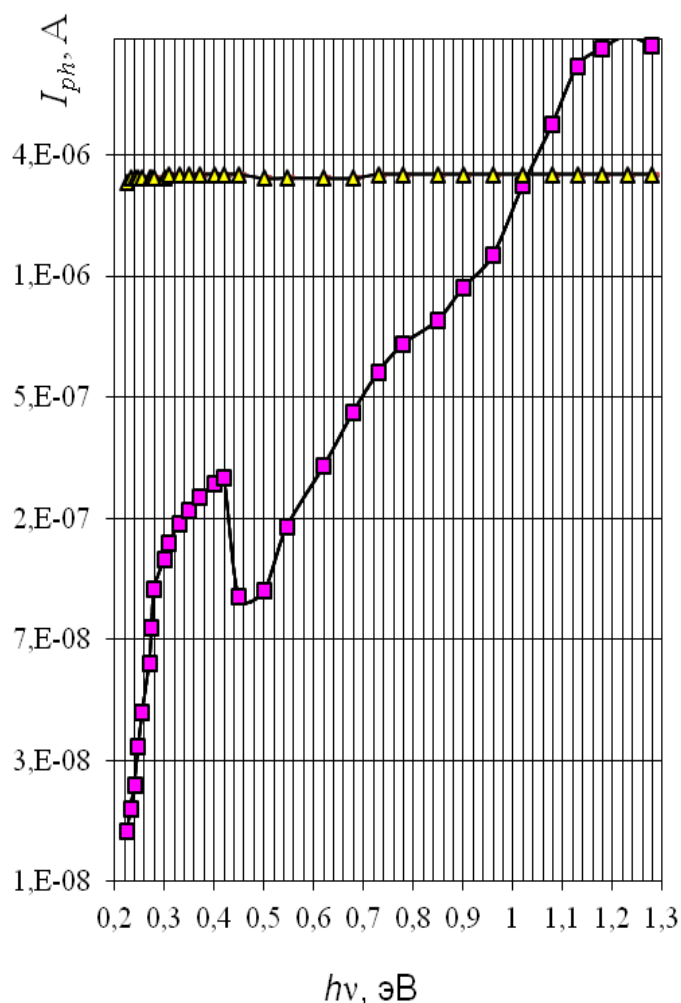
Биз томондан ўрганилган Si<S> ва Si<Mn> намуналарида, мос равишда, 0,56эВ ва 0,54эВ минимумларида кучсиз ФЎИҚС кузатилди. 8-расмда Si<Mn,S> намунасида қоронғи ва ёруғлик ҳолатидаги ФЎнинг спектрал боғлиқлиги кўрсатилган. Расмдан шу нарса аён бўлдики, Mn ва S билан легирланган намуналарида ФЎ қоронғи ҳолатда  $h\nu \approx 0,22\div 0,226$  эВ дан бошланади.

Фотонлар энергияси ўсиши билан  $h\nu = 0,226\div 0,42$  эВ оралиғида ФЎ тўхтовсиз ўсиб боради ва босқичма-босқич фототокни тўйиниш худудига кириб боради.  $h\nu = 0,42$  эВ нуқтасида ФЎни кескин тушиши кузатилади, Фотонларнинг энергияси кейинчалик ўсиб бориши нисбий чуқур минимум  $h\nu = 0,48$  эВ эга бўлган ФЎни сезиларли пасайишига олиб келади.  $h\nu = 0,226\div 0,48$  эВ оралиғида монотон бўлмаган ФЎ, бизнинг фикримизча, Г. Луковски назариясида ёритилган ионизациянинг кундаланг кесимининг монотон бўлмаган ўзгариши билан боғлиқдир.

Si<S> намунасини фотоўтказувчанлигини тадқиқ этиш жараёнида  $E_1 = 0,25$  эВ,  $E_2 = 0,45$  эВ,  $E_3 = 0,55$  эВ,  $E_4 = 0,85$  эВ сатҳлар ва  $E_i \approx 0,25$  эВ  $\div$  0,52 эВ соҳада фотоўтказувчанликни инфрақизил сўндириш (ФЎИҚС) ходисаси аниқланди.

Тўғри йўналишда уланилган Si<S> намунада  $E_i \approx 0,25$  эВ  $\div$  0,5 эВ соҳада, қоронғида манфий фотоўтказувчанлик аниқланди. Бу ҳодиса заряд ташувчиларнинг инжекцияси билан боғлиқ.

Si<Mn,S> намунасининг  $T=77K$  ҳароратда ФЎ ни ўрганиш орқали  $E_1 = 0,226$  эВ ва  $E_1 = 0,86$  эВга тенг ионизация энергиялари аниқланди



**8-расм. Si<Mn,S> намунасида қоронғи ва ёруғлик ҳолатидаги Фўнинг спектрал боғлиқлиги**

$\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  ячейкали кластерда электронлар ҳолатини сонли ҳисоблаш натижасида оралиқ қиймати  $E_g = 0,22\text{эВ}$ га тенг энергетик масофа аниқланган. Ушбу қиймат Si<Mn,S> намунасида Фўни ўрганиш натижасида оралиқ қиймати  $E_i \approx 0,226\text{эВ}$ га тенг энергетик масофа аниқланиши билан тасдиқланди. Бу масофа ғалаёнланган электронни киришмавий сатҳдан ўтказувчанлик сатҳига ўтиши билан боғлиқдир (8-расм).

ФСМ 1202 қурилмасида Si<Mn,S> намунасининг ютилиш спектри олинди. Изланиш натижаларига кўра  $\lambda = 2,01\text{ мкм}$ ,  $\lambda = 4\text{ мкм}$  оралиқларида олтингугурт марганец киришмавий атомлари ютулиш коэффиценти сезиларли даражада пасаяди. Бундан фарқли равишда Si<Mn,S> намунасида Si<Mn> ва Si<S> намуналарида деярли мавжуд бўлмаган  $\lambda = 1,33\text{ мкм}$  ( $h\nu = 0,93\text{ эВ}$ ) оралиғида сезиларли ютулиш пики вужудга келади.

Муаллифлар<sup>7</sup> таъкидлашича 400÷450К ҳароратлар оралиғида  $\alpha\text{-MnS}$ да заряд ташувчиларни ишорасининг ўзгариши кузатилган. Уларни тажриба натижаларига мувофиқ  $T < 400\text{К}$  бўлган ҳароратда марганец моносулфиди  $\alpha\text{-MnS}$   $p$ -турдаги яримўтказгич ҳисобланади (ток ташувчиларни ҳаракатчанлиги  $0,065\text{ см}^2\text{ В}^{-1}\text{ с}^{-1}$  бўлган),  $T > 450\text{К}$  бўлган ҳароратда эса заряд ташувчилар электронлар бўлиб, уларни ҳаракатчанлиги деярли 2 тартибга ошади.  $\alpha\text{-MnS}$  монокристалларини электр ҳоссаларинни ўрганиш жараёнида шу нарса аниқландики<sup>7</sup>, ҳарорат ўзгариши билан (111) ва (100) кристаллографик йўналишларда солиштирма электр қаршилик турлича бўлган.

<sup>7</sup>Heikens, H.H. Electrical properties of  $\alpha\text{-MnS}$  / H.H. Heikens, C.F. van Bruggen, C.J. Haas // J. Phys. Chem. Solids. – 1978. – V. 39. – P. 833 – 840

<sup>7</sup>Huffman, D.R. Optical properties of  $\alpha\text{-MnS}$  / D.R. Huffman, R.L. Wild // Phys. Rev. 1967 – V.156, No.3. - P. 989-997

## ХУЛОСА

$\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  ячейкасига эга бўлган структура параметрларини сонли ҳисоблаш ва Mn ҳамда S билан легирланган монокристалл кремнийнинг фотоэлектрик хусусиятларини тадқиқ қилиш натижасида қуйидаги хулосалар қилинди:

1. Монокристалл кремний намунасини олтингугурт ва селен билан юқори ҳароратли легирлаш натижасида юзада емирилиш деярли кузатилинмаган намуналар тажрибада олинган.

2.  $\text{Si}\langle\text{Mn,S}\rangle$  намунасинининг  $T=77\text{K}$  ҳароратдаги фотоўтказувчанликни ўрганиш орқали  $E_f=0,226$  эВ ва  $E_g=0,86$  эВ га тенг ионизация энергиялари аниқланган.

3.  $\text{Si}\langle\text{S}\rangle$  намунасини фотоўтказувчанлигини тадқиқ этиш жараёнида  $E_1=0,25$  эВ,  $E_2=0,45$  эВ,  $E_3=0,55$  эВ,  $E_4=0,85$  эВ сатҳлар ва  $E_f\approx 0,25$  эВ ÷  $0,52$  эВ соҳада фотоўтказувчанликни инфрақизил сўндириш (ФЎИҚС) ходисаси аниқланган.

4. Тўғри йўналишда уланилган  $\text{Si}\langle\text{S}\rangle$  намунада  $E_f\approx 0,25$  эВ ÷  $0,5$  эВ соҳада, қоронғида манфий фотоўтказувчанлик аниқланган. Бу ходиса заряд ташувчиларнинг инжекцияси билан боғлиқлиги аниқланган.

5. Ёруғлик нури остида Mn ва S билан легирланган КДБ-1 намунасида  $T = 198\text{K}$  ва  $123\text{K}$  ҳароратларда, олтингугурт ва марганецга оид чуқур сатҳларни қайта қиймат ўзгариши билан боғлиқ бўлган, заряд ташувчилари қийматининг ўзгариш эффементи топилган.

6. Mn ва S билан легирланган монокристалл кремний намунасида салт кучланиши ва қисқа туташув тоқлари кенг инфрақизил соҳани қамраб олиши ва Mn ва S киришмаларига эга кремнийни қуёш элементи хосасига эгаллиги аниқланган.

7.  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  ячейкаси  $\text{Si}$  панжарасини ИҚ-тебранма ютилиш спектрида, FT IR Nicolet iS50 қурилмаси ёрдамида  $\text{Si}\langle\text{Mn,S}\rangle$  намунаси тебраниш спектрида қиймати  $1011,50$   $\text{cm}^{-1}$  га тенг бўлган энг юқори мода билан мос келувчи, қиймати  $1056,40$   $\text{cm}^{-1}$  га тенг энг юқори мода аниқланган.

8.  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  ячейкаси кластерда электронлар ҳолатини сонли ҳисоблаш натижасида аниқланган оралик қиймати  $E_g = 0,22$  эВ га тенг бўлган энергетик сатҳ  $\text{Si}\langle\text{Mn,S}\rangle$  намунасида фотоўтказувчанлигида кузатилган оралик қиймати  $E_f\approx 0,226$  эВ га тенг энергетик масофа билан тасдиқланган. Бу масофа ғалаёнланган электронни киришмавий сатҳдан ўтказувчанлик сатҳига ўтиши билан боғлиқдир.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.27.06.2017.FM./Т.34.01 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ  
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКОМ ИНСТИТУТЕ,  
ИНСТИТУТЕ ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ,  
САМАРКАНДСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ**

---

**ТАШКЕНТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ**

**МАВЛЯНОВ АБДУЛАЗИЗ ШАВКАТОВИЧ**

**ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КРЕМНИЯ С КЛАСТЕРАМИ  
ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ**

**01.04.10 – Физика полупроводников**

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD)  
ПО ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИМ НАУКАМ**

**Ташкент – 2018**

**Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № B2017.1.PhD/FM37.**

Диссертация выполнена в Ташкентском государственном техническом университете им. Ислама Каримова

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице по адресу: [fti.uz](http://fti.uz) и на Информационно-образовательном портале «ZiyoNet» по адресу: [www.ziyo.net](http://www.ziyo.net).

**Научный руководитель:** **Илиев Халмурад Маджидович**  
доктор физико-математических наук, профессор

**Официальные оппоненты:** **Рахматов Ахмад Зайнидинович**  
доктор технических наук, с.н.с.

**Матчанов Нураддин Азадович**  
кандидат физико-математических наук, с.н.с.

**Ведущая организация:** **Национальный Университет Узбекистана**

Защита диссертации состоится «\_\_» \_\_\_\_\_ 2018 года в \_\_\_\_ часов на заседании Научного совета DSc.27.06.2017.FM./T.34.01 при Физико-техническом институте, Ионно-плазменных и лазерных технологий, Самаркандском государственном университете. (Адрес: 100084, г. Ташкент, ул. Бодомзор йули, дом 26. Административное здание Физико-технического института, зал конференций. Тел./Факс: (99871) 235-30-41; e-mail: [info.fti@uzsci.net](mailto:info.fti@uzsci.net))

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Физико-технического института (зарегистрирована за № \_\_\_\_). Адрес: 100084, г. Ташкент, ул. Бодомзор йули, дом 26. Административное здание Физико-технического института, зал конференций. Тел./Факс: (99871) 235-30-41.

Автореферат диссертации разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2018 г.  
(протокол рассылки № \_\_\_\_\_ от «\_\_» \_\_\_\_\_ 2018 г.)

**С.А. Бахрамов**

Председатель научного совета по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., академик

**А.В. Каримов**

Ученый секретарь научного совета по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

**И.Г. Атабаев**

Председатель научного семинара при научном совете по присуждению ученых степеней д.ф.-м.н., профессор

## **ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))**

**Актуальность и востребованность темы диссертации.** В настоящее время, в мире в активно развивающемся направлении полупроводниковой физики пристальное внимание уделяется получению материалов на основе кремния с примесными атомами, демонстрирующими абсолютно новые свойства, отличающиеся от свойств базового материала. В этом аспекте важными задачами являются раскрытие перспективных функциональных возможностей кремния с новыми ячейками в матрице материала, а также применение этого материала в микроэлектронике, материаловедении и других областях.

В мире на сегодняшний день уделяется большое внимание изучению свойств кремния с наноразмерными соединениями. При этом одной из важных задач является проведение целевых научных исследований в следующих направлениях: исследование энергетического и колебательного спектров, оптимизированной геометрии кремния с новыми элементарными ячейками, теоретическое и экспериментальное исследование свойств кремния с примесными атомами элементов II и VI групп, сравнительный анализ параметров численного расчета с результатами экспериментальных исследований, а также прогнозирование на этой основе свойств новых материалов.

В соответствии со Стратегией действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан, особое внимание уделяется вопросам стимулирования научно-исследовательской и инновационной деятельности, создания эффективных механизмов прикладного применения достижений научно-инновационной деятельности. В частности, основное внимание уделяется вопросам развития технологии синтеза новых полупроводниковых материалов, состоящих из элементарных ячеек «кремний – примесный атом». Особо следует отметить, что данная деятельность осуществляется в рамках объявленного «Года поддержки активного предпринимательства, инновационных идей и технологий», нацеленного на получение научных результатов, отвечающих современным требованиям научного развития. В этом плане особое внимание уделяется вопросам исследования оптических, фотоэлектрических и электрических свойств кластерных структур с участием примесных атомов на основе полупроводникового кремния. Вместе с тем, актуальной задачей является численный расчет параметров кремния с кластерными структурами и сравнительный анализ результатов численного расчета с экспериментальными результатами, что позволило бы прогнозировать новые свойства материала и на этой основе обеспечить широкое прикладное применение полупроводникового кремния.

Данное диссертационное исследование в определенной степени служит выполнению задач предусмотренных в Постановлении Президента Республики Узбекистан ПП–1442 «О приоритетных направлениях развития индустрии Республики Узбекистан на 2011-2015 гг.» от 15 декабря 2015 года,

№ УП-4947 «О мерах по дальнейшей реализации Стратегии действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017-2021 годах» от 7 февраля 2017 года и №ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организаций, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года, а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере.

**Соответствие исследования приоритетами развития науки и технологий.** Диссертация выполнена в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий ППИ-3 → «Энергетика, энерго-ресурсосбережение, транспорт, машино- и приборостроение; развитие современной электроники, микроэлектроники, фотоники, электронного приборостроения».

**Степень изученности проблемы.** Л.И. Овсянниковой *ab initio* методом Хартри–Фока в базисе 6-31G рассчитаны оптимизированная конфигурация, электронная структура, перенос заряда, запрещенная щель, полная энергия, энергия когезии, карты электронной плотности, ИК- и рамановские спектры и соответствующие им моды собственных акустических колебаний ряда полупроводниковых кластеров.

На сегодня в развитие диффузионной технологии определен вклад внесла школа академика М.С. Саидова, в частности, профессором И.Г. Атабаевым и Н.А. Матчановым усовершенствована технология низкотемпературной диффузии примесей в сплавы кремний-германий<sup>1</sup>, а также доктором технических наук А.З. Рахматовым предложен новый кассетный способ диффузии примесей, который используется в производстве силовых диодов с оптимизированными параметрами<sup>2</sup>.

Академиками АН РУз М.К. Бахадырхановым и А.Т. Мамадалимовым и их сотрудниками исследованы фотоэлектрические, магнитные и оптические свойства кремния, легированного примесными атомами S, Se и Mn и другими примесями. Вместе с тем, Р. А. Муминовым и его сотрудниками исследованы механизмы мультиэкситонной генерации носителей в кремнии.

Однако экспериментальное исследование атомной структуры кластеров вообще, и кремниевых в частности, является крайне сложной задачей. Остаются нерешенными вопросы взаимосвязи геометрических параметров и электронных свойств кластеров<sup>3</sup>.

**Связь диссертационного исследования с тематическими планами научно-исследовательских работ высшего образовательного учреждения, где выполнена диссертация.** Диссертация выполнена в Ташкентском государственном техническом университете в рамках

<sup>1</sup> И.Г. Атабаев, Н.А. Матчанов и др. Низкотемпературная диффузия лития в твердые растворы кремний-германий ФТТ, 2001, В.12, С. 2140-2143.

<sup>2</sup> Патент РУз № 5328. Способ изготовления кремниевых ограничителей напряжения / Муратов А.Ф., Рахматов А.З., Меркулов А.А., Исмоилов И.Р. // Бюллетень № 3 от 30.09.1994 г

<sup>3</sup> Н.А. Борщ и др. Теоретическое исследование атомной структуры и электронно-энергетического спектра кремниевых нанокластеров. Тез. докладов VII Межд. конф. «КРЕМНИЙ–2010». Н. Новгород, 2010. С.131-132.

Государственной программы научно-исследовательских работ РУз № Ф2-44 на тему: «Исследование механизма самоорганизации примесных атомов в полупроводниках и управление их параметрами» (2012-2016) и международного проекта «Узбекистан-Туркменистан 2013» №МК-37/2012 «Разработка и изготовление принципиально новых фотоэлементов с широкой спектральной чувствительностью (0,1÷3 мкм) на основе кремния с нановаризонными структурами» (2013-2015), а также проекта ПФИ ФА-ФЗ-004 «Изучение фундаментальных новых физических моделей, механизмов, способов для формирования высокоэффективных, дешевых фотопреобразователей, а также долговечных фотоэнергетических установок на их основе (НПО «Физика-Солнце» ФТИ АН РУз)» (2017-2020).

**Целью исследования** является численный расчет параметров кластерной структуры с ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  (кремний два-марганец два-сера) и исследование фотоэлектрических свойств монокристаллического кремния, легированного Mn и S.

**Задачи исследования:**

исследование оптимальных режимов безэрозионного диффузионного легирования кремния S с обеспечением формирования комплексов MnS с участием атомов Si при последовательной диффузии Mn;

исследование фотоэлектрических свойств кремниевых образцов с атомами S, Mn, комплексами Mn и S;

выполнение численного расчета параметров ячеек  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  в зависимости от числа атомов (87 атомов) и их структурного положения в кластерах *ab initio* квантово-механическим и полуэмпирическим методами;

сравнительный анализ результатов численного расчета параметров ячеек  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  с экспериментальными данными;

**Объектом исследования** являются образцы монокристаллического кремния *p* – типа, марки КДБ -1(с исходным удельным сопротивлением  $\rho = 1$  Ом·см), и модель кристаллической решетки кремния структуры алмаза с ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$ .

**Предметом исследования** являются закономерности образования кластеров с ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$ , фотоэлектрические свойства кремния, легированного S и Mn, сравнение результатов численного расчета с экспериментальными данными.

**Методы исследований.** В работе применены комплексные информативные методы экспериментальной физики: вольтамперные, фотоэлектрические методы изучения структур с *p-n*-переходами; ИК-колебательная спектроскопия, а также численный расчет *ab initio* квантово-механическим и полуэмпирическим методом.

**Научная новизна:**

получены образцы монокристаллического кремния с практическим отсутствием эрозии поверхности образцов после высокотемпературного легирования серой;



определены уровни ионизации, область ИК-гашения в образце Si с S, а также отрицательная фотопроводимость при прямом включении, обусловленная инжекцией носителей заряда;

обнаружен эффект изменения знака носителей заряда при освещении образца кремния, легированного Mn и S при температуре  $T=123\text{K}$  и  $T=198\text{K}$ , обусловленный перезарядкой глубоких уровней, связанных с этими примесями;

выявлена существенная доля инфракрасной (ИК)-составляющей в значениях напряжения холостого хода и тока короткого замыкания в образцах монокристаллического кремния, легированного Mn и S;

рассчитаны полная энергия, ИК-колебательные и электронные спектры, положения электронов структуры с ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  методом численного расчета;

обнаружено достаточно хорошее совпадение значения мод колебаний, размера щели кластерной структуры с ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  с экспериментальными данными исследования колебательных спектров и фотопроводимости образца, легированного Mn и S.

**Практические результаты исследования:** Примененный метод численного расчета вместе с результатами фотоэлектрических измерений может быть использован для дальнейших исследований в разработке нового поколения фотоэлементов на основе кремния с примесными атомами элементов II и VI групп.

**Достоверность результатов исследования** обеспечивается использованием комплексных независимых методик измерения и обработки данных, а также их соответствием современным понятиям физики и техники полупроводников.

**Научная и практическая значимость результатов исследования.** Научная значимость результатов заключается в том, что полученные в работе результаты представляют отдельный интерес для теоретического рассмотрения атомного строения кластеров и их электронно-энергетических свойств.

Практическая значимость работы заключается в расширении представления о свойствах полупроводников с кластерами примесных атомов и возможности изготовления новых приборов на основе кластеров примесных атомов, в частности, эффективных фотопреобразователей с расширенной спектральной областью чувствительности.

**Внедрение результатов исследования.** На основе численного расчета параметров структуры с ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  и исследования особенностей фотоэлектрических свойств монокристаллического кремния, легированного Mn и S:

режимы диффузионного легирования кремния элементами II и VI группы применены при выполнении проекта Иновационного Центра Мексики «Trasporte Mono-y Bipolar en Estructuras Semiconductors» для получения безкоррозионных полупроводниковых структур (Справка инновационного Центра Мексики 2017 года 5 декабря). Использование

научных результатов позволило расширить спектральный диапазон полупроводниковых фоточувствительных структур с нанокластерами;

технологические процессы диффузионного легирования кремния путем многоступенчатого медленного повышения температуры применены акционерным обществом «FOTON» при изготовлении полупроводниковых структур (Справка №02-2075 АК «ЎЗЕЛТЕХСАНОАТ» от 2017 года 6 октября). Использование научных результатов позволило обеспечить однородное легирование полупроводниковых образцов с устранением эрозии на поверхности.

метод создания диодной структуры с требуемой глубиной *p-n*-перехода посредством быстрого охлаждения после многоэтапной низкотемпературной диффузии кремния примесями использован при выполнении проекта ЁА-ФА-Ф004 на тему: «Разработка технологии формирования и изготовления двухкоординатно-чувствительных детекторов на основе монокристаллического кремния большого диаметра» (Справка № ФТА -02-11/1247 Агентства по науке и технологиям Республики Узбекистан от 4 декабря 2017 года). Использование научных результатов позволило обеспечить воспроизводимость требуемой глубины диффузии;

**Апробация работы.** Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 9 международных и 4 республиканских конференциях.

**Опубликованность результатов.** По материалам диссертации опубликовано 21 научная работа, из них 8 статей опубликованы в журналах рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов.

**Структура и объем диссертации.** Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения и списка использованной литературы. Тест диссертации изложен на 125 страницах.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована актуальность проблемы и тема диссертационной работы, сформулированы основные цели и задачи, указана научная новизна и практическая значимость результатов, структура диссертации.

В первой главе под названием «Состояние проблемы и тенденции управления свойствами кремния с кластерными структурами» приведен обзор литературы по состоянию проблемы использования различных методов, направленных на изменение свойств полупроводникового кремния посредством формирования в них кластеров, а также изучения специфических особенностей взаимодействия между нанокластерами и материалом окружающей их матрицы кремния. На основе анализа имеющихся теоретических и экспериментальных данных сформулирована постановка задачи, определены цели и задачи данной диссертации.

Во второй главе, названной «Механизмы диффузии примесных атомов в кремнии. Собственные точечные дефекты и их взаимодействие с легирующими примесями» приведены теория и соответствующие концепции диффузии в кристаллическом кремнии в соответствии с общепризнанным пониманием процесса. Рассмотрены механизмы примесной диффузии и самодиффузии. Описана роль дефектов и их взаимодействие с примесями.

Установлено, что диффузия в примесном полупроводнике протекает ускореннее по сравнению с диффузией в собственном вследствие, во-первых: повышения уровня Ферми, которое влияет на  $n/n_i$ , а, во-вторых: коэффициента ускорения диффузии  $h$  благодаря наличию электрического поля.

В процессе легирования селеном и серой имеет место эрозия поверхности пластин. Определены оптимальные режимы легирования данных примесей в кремний посредством процесса диффузии. Основная суть предлагаемого способа легирования заключается в том, что диффузия проводится в несколько этапов с постепенным повышением температуры. При этом температура, время выдержки в каждый определенный этап, регулируются таким образом, что давления паров диффузантов в кварцевой ампуле постепенно увеличивались, но не превышали 0,5 атм., что позволяет практически полностью исключить эрозию поверхности кристалла в кремнии.

В предложенном методе полированные с обеих сторон кремниевые образцы размером  $10 \times 4 \times 1$  мм<sup>3</sup>, а также навески селена помещались в кварцевые ампулы, имеющие форму цилиндра с внутренним диаметром  $\sim 10$  мм и длиной 76 мм. Толщина стенок кварца составляла  $\sim 1$  мм. Ампулы откачивались до  $10^{-5}$  мм рт.ст. и запаивались. После чего ампулы помещались в рабочую область горизонтальной печи при комнатной температуре.

Диффузия примесями S и Se в кремний проводилась в отдельных кварцевых ампулах в интервале температур  $1150 \div 1250$  °C в течение  $10 \div 18$

часов. Параллельно проводилась диффузия примесей Se и S в кремний по обычной технологии с целью сравнения параметров кремния, полученного по этим двум технологиям.

Как показали экспериментальные результаты, в легированных образцах, полученных по новой технологии, практически полностью отсутствует эрозия поверхности кристаллов. В образцах же, которые легировались обычным способом, имели место существенные эрозии поверхностей до глубин 150÷200 мкм.

В результате исследования электрических и гальваномагнитных свойств кремния, легированных элементами VI группы по новой технологии, было выявлено, что в этих образцах концентрация электроактивных атомов увеличивается почти в 2÷2,5 раза, чем в образцах легированных по обычной технологии при такой же температуре. Обнаружено существенное ускорение диффузионного процесса этих примесей в кремний (почти в 3÷4 раза).

Диффузионный путь рассчитывался по формуле  $x = \sqrt{2Dt}$ , а коэффициент диффузии для каждой отдельной примеси рассчитывался по формуле  $D = D_0 \exp(-E_a/kT)$ , предэкспоненциальный множитель  $D_0$  и энергия активации  $E_a$  процесса диффузии для каждой примеси брались в справочных данных.

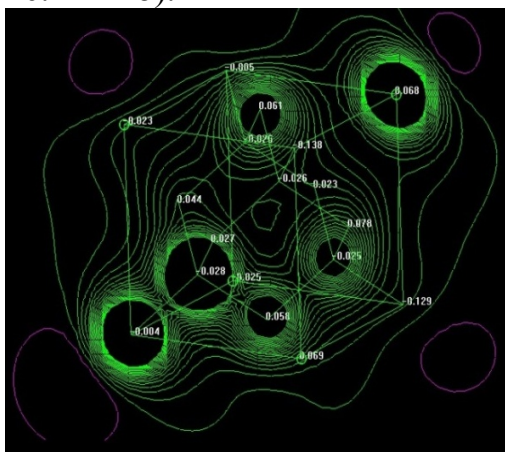
Усовершенствованная новая технология легирования кремния примесями VI группы, позволяет полностью исключить эрозию поверхности кристалла в процессе диффузии, увеличить концентрацию электроактивных атомов, а также позволяет существенно ускорить внедрение этих примесей в кремний.

В третьей главе диссертации, названной «**Численный расчет базовой решетки кремния с ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$** » представлены результаты численного расчета параметров решетки Si со структурой алмаза с гипотетическим расположением примесных атомов S и Mn в узлах решетки кремния с образованием соответствующих тетраэдрических ячеек типа  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$ .

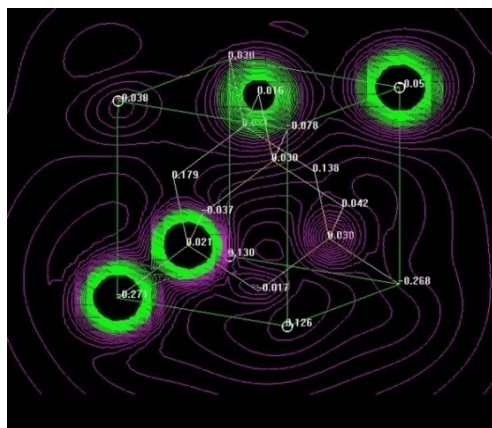
Пользуясь доступными квантово-химическими и молекулярно-динамическими расчетами был построена узел алмазной решетки Si с четырьмя окружающими его атомами, расположенными в вершинах правильного тетраэдра, вписанного в куб, а также кристаллическая структура решетки типа алмаза. Для Si были выставлены соответствующие параметры решетки  $a = 5,43095 \text{ \AA}$ ,  $d(\text{A-B}) = 2,35167 \text{ \AA}$  и  $d(\text{A-A}) = 33,84026 \text{ \AA}$ .

Для численного расчета и изучения электронных свойств атомных кластеров были применены ab initio квантово-механические методы, в частности ограниченный/неограниченный метод Хартри–Фока (RHF/UHF), метод функционала электронной плотности (DFT) и полуэмпирические методы, в частности ZINDO/S. Полуэмпирическим квантово-химическим методом были рассчитаны и построены карты электростатического потенциала для базовой решетки Si как показано на рис.1 и 2 а) и кремния с

кластером, состоящим из 3-ёх тетраэдрических узлов  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$ , как показано на рис.1 и 2 б).



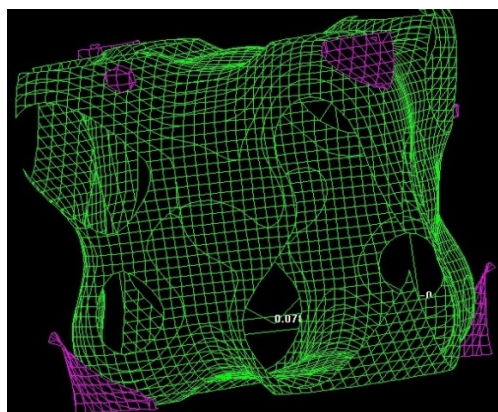
а) базовой решетки Si



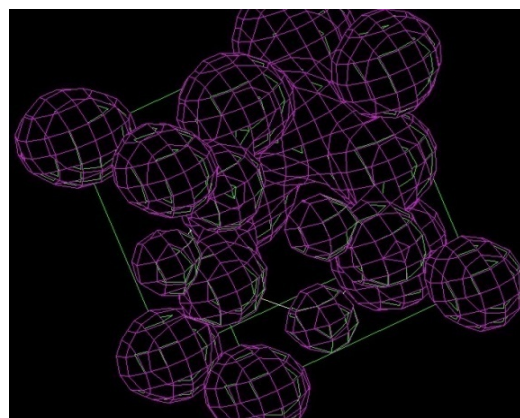
б) базовой решетки Si с ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$

**Рис.1. Зарядовое состояние решетки**

Из-за наличия сильной ионной составляющей мы видим заметный вклад ионной связи и уменьшение ковалентной составляющей. Расчету спектров предшествовал поиск равновесной конфигурации в режиме орт. До режима оптимизации полная энергия составляла  $E_{\text{полн}} = -77436,6$  ккал/моль.



а) базовой решетки Si



б) базовой решетки Si с ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$

**Рис.2. 3-D карта электростатического потенциала**

Оптимизация конфигурации проводилась методом Полака-Рибери (сопряженных градиентов). В расчете кластера  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$ , например, после двадцати полных циклов полная энергия изменилась до  $E_{\text{полн}} = -79405,1$  ккал/моль.) В результате оптимизации геометрии методом Полака-Рибери (сопряженных градиентов) после 20 полных циклов и 50 итераций структура молекул слегка отклоняется от правильной геометрической конфигурации. В этой связи для дальнейших расчетов мы выбрали структуру решетки с минимальной энергией с правильной геометрической конфигурацией.

Для расчета колебательного спектра и молекулярных орбиталей (МО) был использован полуэмпирический метод расчета ZINDO-S. На рис. 3 представлены результаты расчета ИК-колебательного спектров структуры с

ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  с наиболее интенсивной модой  $1056.40 \text{ см}^{-1}$ . Проведено моделирование положения электронов, а также построение карты электронной плотности молекулярных орбиталей кластера  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  (рис. 4), в виде контурных поверхностей с высшей занятой орбиталью HOMO = 0,1431 эВ и низшей незанятой орбиталью LOMO = 0,0811 эВ.

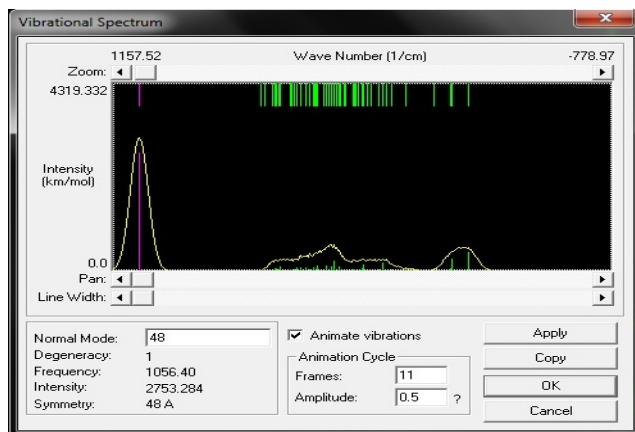


Рис.3. ИК-спектр ячейки  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  с модами колебаний

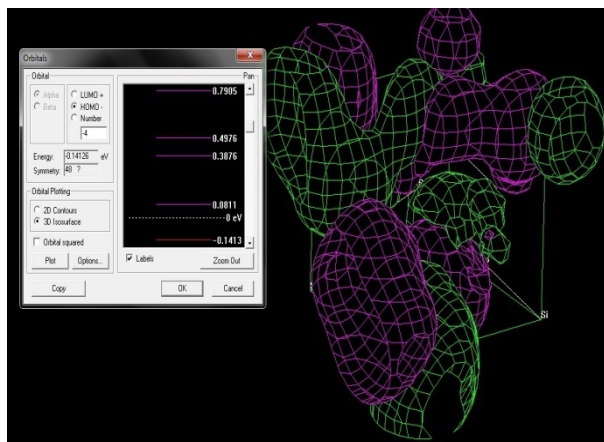


Рис.4. Электронная плотность МО ячейки  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$

Для расчета электронного спектра выбран неограниченный по спину (для систем с закрытыми оболочками) метод Хартри–Фока (UHF) с набором базисных функций 6-31G. Как показали предварительные тестовые расчеты, этот метод, с одной стороны, является в несколько раз более точным, чем полуэмпирические методы, в частности MNDO, а с другой — требует в несколько раз меньших затрат по времени счета, чем DFT, точность которого только на несколько процентов выше<sup>4</sup>. Верхняя шкала показывает все возбужденные электронные состояния, нижняя шкала показывает только состояния, которые активны на спектрографе с пиками поглощения 467.75 нм, 517 нм, 543 нм, 602 нм, 688 нм, 1227 нм, отвечающим энергиям переходов

2,65эВ, 2,39 эВ, 2,28эВ, 2 эВ, 1,8 эВ и 1,01 эВ, а также их относительные интенсивности.

В четвертой главе диссертации, названной «**Электрические, фотоэлектрические и оптические свойства кремния с примесными атомами Mn и S**» приведены результаты фотоэлектрических и электрических измерений образцов кремния, легированных S, Mn, MnS. Предпринята попытка проанализировать связь между результатами, полученными в ходе указанных экспериментов и численного расчета.

В качестве объектов электрических и фотоэлектрических исследований были выбраны образцы Si, легированные примесями Mn и S. В работе были использованы пластины p-Si с толщиной 1 мм и 0,79 мм (исх. КДБ-1). Легирование серой и марганцем проводилось путем диффузии в запаянных в предварительно откачанных ( $10^{-4}$  мм рт.ст.) кварцевых ампулах при

<sup>4</sup> Frank Jensen. Introduction to Computational Chemistry, Second Ed. 2007 John Wiley & Sons, Ltd. P.133-204.

температуре 1260<sup>0</sup>С и 1200<sup>0</sup>С соответственно, в течение времени, достаточного для однородного легирования.

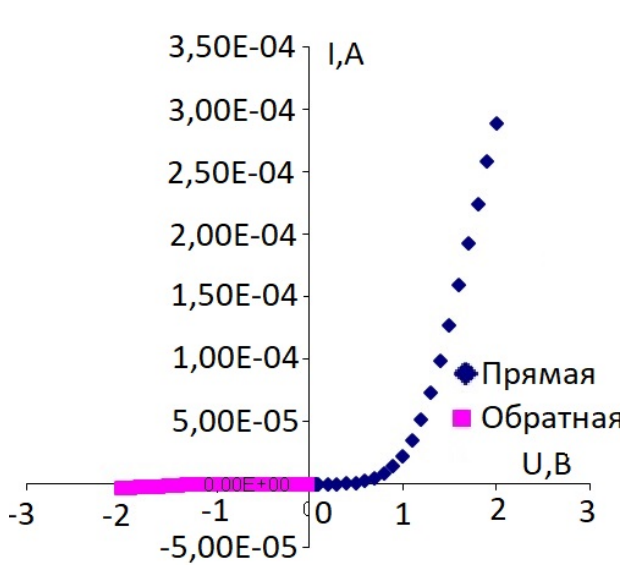


Рис.5. Темновая ВАХ образца Si<B,S>(исх. КДБ-1)

Темновая вольт-амперная характеристика кремниевой *p-n* структуры, легированной S (исх. образец КДБ-1) как показано на рис. 5, имеет ярко выраженный вид несимметричной кривой. В области прямых смещений тока, мы видим его экспоненциально сильный рост с ростом приложенного напряжения. На участке кривой обратного тока ток от напряжения как обычно не зависит сильно.

Как и в классическом барьере Шоттки в обоих случаях, при прямом и обратном смещении, ток обусловлен

основными носителями, т.е. электронами, поскольку в них отсутствуют рекомбинационные и диффузионные процессы. При исследовании ВАХ структуры Si<Mn> (исх. КДБ-3) наблюдался экстремальный характер изменения обратного тока *p+-n* структуры при темноте как показано на рис. 6. Из рис. 6 видно, что наблюдается экстремальный характер зависимости обратного тока. Подобное поведение тока при обратном смещении можно объяснить наличием в области объемного заряда слоя с малой, практически отсутствующей, проводимостью. Проводимость слоя может изменяться в широких пределах путем инжекции в него носителей тока, так как при ничтожной концентрации собственных носителей в самом слое проводимость слоя будет определяться концентрацией инжектированных носителей. При создании разности потенциалов между контактами возникает электрический ток. Предположительно, слой содержит значительное количество кластеров и примесей, на которых происходит рассеяние инжектированных носителей. Аналогичные эффекты приведены в данной книге<sup>5</sup>.

<sup>5</sup> Г.И. Епифанов. Физические основы микроэлектроники. М.: Книга по Требованию, 2012. С. 356-360.

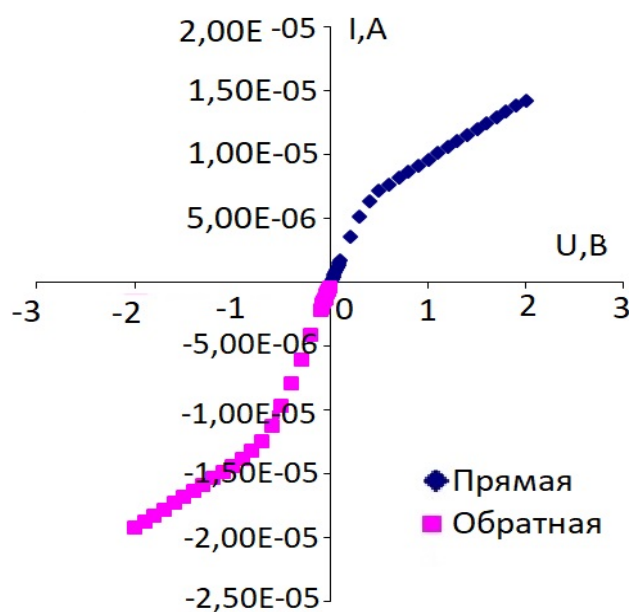


Рис.6. Темновая ВАХ образца Si<B,Mn>(исх. КДБ-3)

В запрещенной зоне образца имеется большое число локальных уровней, способных захватывать свободные носители тока. Инжектированные носители, захваченные ловушками, образуют неподвижный пространственный заряд и в формировании проводимости структуры не участвуют. Проводимость  $n^+ - p - p^+$  структуры определяется лишь свободными инжектированными носителями не захваченными ловушками. Эти носители также образуют нескомпенсированный пространственный заряд. Пространственный заряд носителей, захваченный ловушками, и

свободных носителей, инжектированных в слой, определяют закономерность прохождения тока при обратном смещении. Фактически, такой ток становится ограниченным пространственным зарядом<sup>6</sup>.

В ИК-колебательном спектре структуры с ячейками  $Si_2Mn_2S$  были выявлены наиболее интенсивные моды колебаний, в частности, мода  $1056.40 \text{ см}^{-1}$  (численный расчет). В ИК-колебательном спектре образца  $Si<Mn,S>$ , полученным на установке FT IR Nicolet iS50 (рис. 7) в диапазоне  $2500 \div 500 \text{ см}^{-1}$  на котором были выявлены моды  $1125,28 \text{ см}^{-1}$ ,  $1011,50 \text{ см}^{-1}$ ,  $919,41 \text{ см}^{-1}$  и  $871,68 \text{ см}^{-1}$ , причем мода  $1011,50 \text{ см}^{-1}$  была наиболее интенсивной. Очевидно, имеется достаточно хорошее совпадение результатов численного расчета ИК-колебательного спектра ( $1056.40 \text{ см}^{-1}$ ) решетки кремния с ячейками  $Si_2Mn_2S$  и колебательного спектра образца  $Si<Mn,S>$ , полученного на установке FTIR Nicolet iS50 ( $1011,50 \text{ см}^{-1}$ ).

В ходе измерения температурной зависимости проводимости для  $Si<MnS>$  (исх. КДБ-3) были выявлены уровни  $E_1 = 0,561 \text{ эВ}$  и  $E_2 = 0,163 \text{ эВ}$ .

Со ссылкой на работу<sup>6</sup> можно утверждать, что уровни  $E_2 = 0,163 \text{ эВ}$  присущи ионам  $Mn^{+3}$  с переходом в  $Mn^{+4}$ . Уровень  $E_1 = 0,561 \text{ эВ}$ , вероятнее всего, принадлежит комплексу с участием атомов Si, Mn и S, так как ни в  $Si<Mn>$ , ни в  $Si<S>$  данный уровень не был обнаружен.

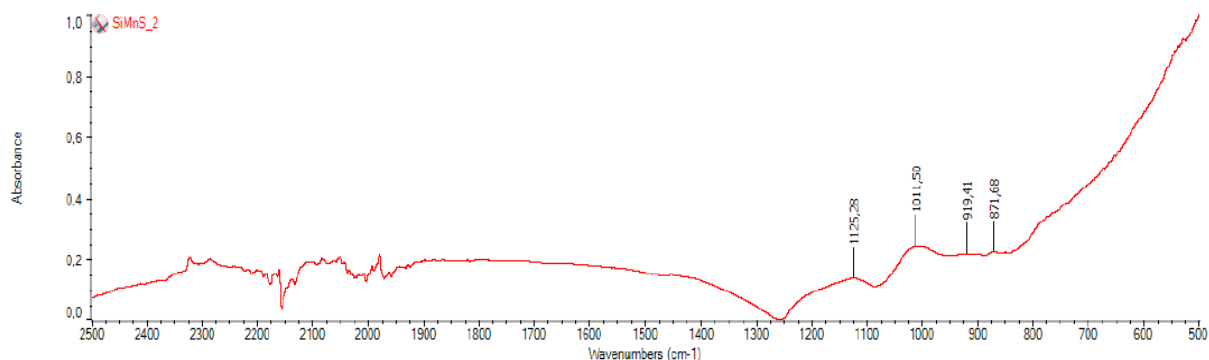
Были измерены напряжения холостого хода и токи короткого замыкания в образцах  $Si<Mn,S>$  в которых наблюдается существенное увеличение в ИК области  $\sim 30\%$  при  $T=300\text{K}$  по сравнению с образцами  $Si<S>$  ( $\sim 23.5\%$ ) и  $Si<Mn>$  ( $\sim 3.3\%$ ) при  $T=300\% \text{ K}$ .

<sup>6</sup> Гнатченко С.Л., Давиденко И.И., Давиденко Н.А., Девин Дж.М. Особенности электро-и фотопроводимости марганцево-германиевых гранатов. ФТТ. Санкт-Петербург, 2002. Т. 44, Вып.1. С. 87-92.



## Find peaks results

Region	Peak	Height
1	871,68	0,22
1	919,41	0,22
1	1011,50	0,24
1	1125,28	0,13



**Рис. 7. ИК-колебательный спектр образца Si<Mn,S>, полученный на FT IR Nicolet iS50 в диапазоне 2500÷500 см<sup>-1</sup> с наиболее интенсивными модами 1125,28 см<sup>-1</sup>, 1011,50 см<sup>-1</sup>, 919,41 см<sup>-1</sup> и 871,68 см<sup>-1</sup>.**

Для измерений был использован криостат с оптическим окошком, источник питания лампы накаливания (установка иммитатора Солнца), светофильтр. Свет от лампы накаливания фокусировался объективом на окошко криостата далее на образец через светофильтр ИКС-1, который устраняет наложение ультрафиолетового и видимого спектров на исследуемый спектральный интервал (300÷750 нм). Данные темнового тока  $i_T$  и фототока  $i_\phi$ , а также напряжения в диапазоне температур  $T=77\text{ K}\div 300\text{ K}$  для образца Si<Mn,S> приведены в таблице 1.

Обнаруженный эффект изменения знака носителей тока в области пространственного заряда в ходе измерений тока короткого замыкания  $i_\phi$ , а также напряжения при освещении при температурах  $T=198\text{ K}$  и  $123\text{ K}$  в образце Si<Mn,S> вероятнее всего обусловлен перезарядкой глубоких уровней, связанных с серой и марганцем.

Исследования фотопроводимости кремния, легированного Mn и Se помощью спектрометра ИКС-21, снабженного криостатом, который позволяет изучать фотопроводимость в широкой области температур ( $T=77\div 350\text{ K}$ ), проводились для определения уровней и явления инфракрасного гашения фотопроводимости (ИКГФП). Для изучения только примесной ФП служил двойной фильтр из полированной пластины монокристаллического кремния, которая была установлена перед окошком криостата после глобара ИКС-21.

**Таблица 1.**

Измерения темнового тока  $i_T$  и фототока  $i_f$ , а также напряжения в диапазоне температур  $T = 77 \div 300 \text{ K}$  для образца  $\text{Si}\langle\text{Mn,S}\rangle$  (исх. КДБ-1  $\rho = 1 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ).

Темн. U, мВ	Осв. U, мВ	U, мВ фильтр $\rho$	Темновой, I, А	Освещен., I, А	Фильтр, I, А	T, К
3,3	156	55,4	$7,7 \cdot 10^{-7}$	$1,3 \cdot 10^{-4}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$	300 К
1,5	342	47,6	$3,2 \cdot 10^{-8}$	$1,2 \cdot 10^{-4}$	$1,7 \cdot 10^{-6}$	223 К
1,7	319	34	$8,3 \cdot 10^{-8}$	$7 \cdot 10^{-5}$	$1,7 \cdot 10^{-6}$	203 К
0,1	-25,6	-1,4	$1 \cdot 10^{-9}$	$-2,2 \cdot 10^{-8}$	$-2,9 \cdot 10^{-9}$	198 К
-30,2	53,8	16,1	$-6,2 \cdot 10^{-8}$	$1,3 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-9}$	123 К
3,2	113	1,9	$2,2 \cdot 10^{-9}$	$3,6 \cdot 10^{-7}$	$1,6 \cdot 10^{-8}$	121 К

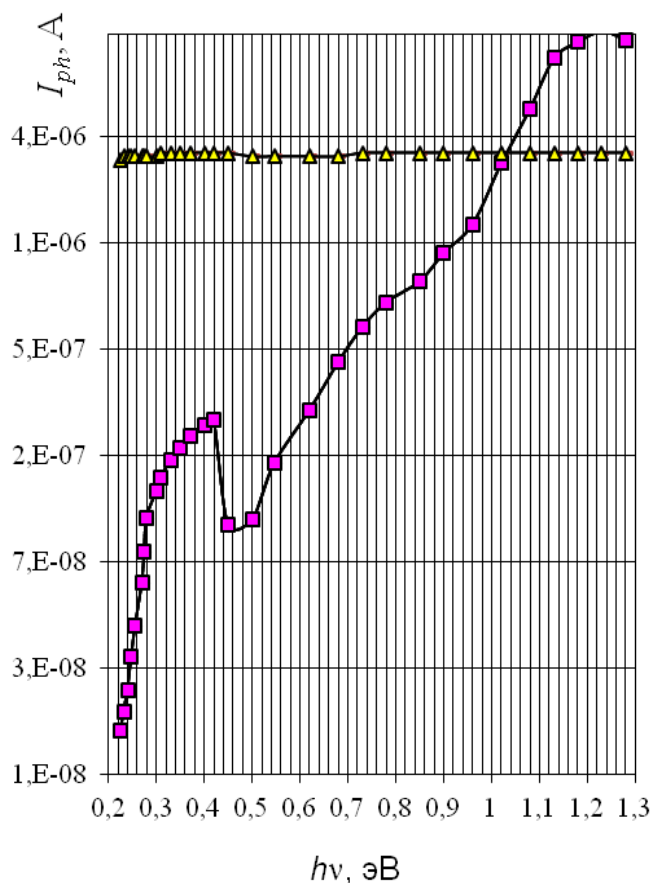
Нами в исследованных образцах  $\text{Si}\langle\text{S}\rangle$  и  $\text{Si}\langle\text{Mn}\rangle$  наблюдалось слабое ИКГФП с минимумом при  $\approx 0,56 \text{ эВ}$  и  $0,54 \text{ эВ}$ , соответственно. На рис. 8 представлена спектральная зависимость ФП образцов  $\text{Si}\langle\text{Mn,S}\rangle$  в темноте и при освещении. Как видно из рисунка, в образцах, легированных Mn и S фотопроводимость при темноте начинается при  $h\nu \approx 0,22 \div 0,226 \text{ эВ}$ .

В интервале  $h\nu = 0,226 \div 0,42 \text{ эВ}$  с увеличением энергии фотонов фотопроводимость увеличивается непрерывно и постепенно наступает область насыщения фототока. В точке  $h\nu = 0,42 \text{ эВ}$  происходит резкий спад фотопроводимости, а дальнейшее увеличение энергии фотонов приводит к заметному уменьшению ФП с относительно глубоким минимумом при  $h\nu = 0,48 \text{ эВ}$ . Немонотонная фотопроводимость в области  $h\nu = 0,226 \div 0,48 \text{ эВ}$ , по видимому, обусловлена тем, что имеет место немонотонная зависимость сечения ионизации, которая приведена в теории Г. Луковского.

При исследовании фотопроводимости образца  $\text{Si}\langle\text{S}\rangle$  были выявлены уровни ионизации  $E_1 = 0,25 \text{ эВ}$ ,  $E_2 = 0,45 \text{ эВ}$ ,  $E_3 = 0,55 \text{ эВ}$ ,  $E_4 = 0,85 \text{ эВ}$ , а также в интервале  $E_i \approx 0,25 \text{ эВ} \div 0,52 \text{ эВ}$  был обнаружен эффект инфракрасного гашения фотопроводимости (ИКГФП).

Также было установлено, что в интервале  $E \approx 0,25 \div 0,55 \text{ эВ}$  в образце  $\text{Si}\langle\text{S}\rangle$  имеет место отрицательная фотопроводимость в темноте при прямом включении структуры, объясняемая инжекцией носителей заряда.

Нами также были определены с помощью исследования фотопроводимости при  $T = 77 \text{ K}$  в образце  $\text{Si}\langle\text{Mn,S}\rangle$  уровни с энергиями ионизации  $E_1 = 0,226 \text{ эВ}$  и  $E_1 = 0,86 \text{ эВ}$ .



**Рис. 8. Спектральная зависимость ФП в образце Si<MnS> в темновых условиях и при постоянной подсветке**

Также был выявлен размер энергетической щели  $E_g = 0,22\text{эВ}$  при численном расчете положения электронов в кластере с ячейками  $\text{Si}_{12}\text{Mn}_2\text{S}$ , подтвержденный появлением уровня  $E_i \approx 0,226\text{эВ}$  при исследовании фотопроводимости образца Si<Mn,S> (рис. 8), который связан с возбужденным переходом электрона из примесного уровня в зону проводимости.

С помощью установки ФСМ 1202 получен спектр поглощения в Si<Mn,S>. Как показали результаты исследования, в таких образцах существенно уменьшается коэффициент поглощения примесей атомов серы в области  $\lambda = 2,01\text{ мкм}$  и  $\lambda = 4\text{ мкм}$ , а также марганца, но появляется заметный пик поглощения в области  $\lambda = 1,33\text{ мкм}$  ( $h\nu = 0,93\text{ эВ}$ ), который практически отсутствует в Si<Mn> и Si<S>, а также исходном кремнии.

Авторы работы<sup>7</sup> показали, что в области температур 400-450К в  $\alpha\text{-MnS}$  наблюдается смена знака носителя заряда. Согласно результатам их эксперимента при температурах  $T < 400\text{К}$  моносульфид марганца  $\alpha\text{-MnS}$  является полупроводником  $p$ -типа с подвижностью носителей тока  $0,065\text{ см}^2\text{ В}^{-1}\text{ с}^{-1}$ , а при  $T > 450\text{К}$  носителями заряда являются электроны и их подвижность возрастает почти на два порядка.

При изучении электрических свойств монокристаллов  $\alpha\text{-MnS}$  авторы в работе<sup>8</sup> показали, что с изменением температуры удельное электросопротивление в кристаллографических плоскостях (111) и (100) различно.

<sup>7</sup>Heikens, H.H. Electrical properties of  $\alpha$  - MnS / H.H. Heikens, C.F. van Bruggen, C.J.Haas // J. Phys. Chem. Solids. – 1978. – V. 39. – P. 833 – 840.

<sup>8</sup>Huffman, D.R. Optical properties of  $\alpha\text{-MnS}$  / D.R. Huffman, R.L. Wild // Phys. Rev. – 1967. – V.156, No.3. - P. 989-997.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе проведенных исследований численного расчета параметров кластерной структуры с ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  (кремний два-марганец два-сера) и исследования фотоэлектрических свойств монокристаллического кремния, легированного Mn и S сделаны следующие выводы:

1. Получены образцы монокристаллического кремния с практическим отсутствием эрозии поверхности образцов после высокотемпературного легирования серой.

2. Определены с помощью исследования фотопроводимости при  $T=77\text{K}$  в образце  $\text{Si}\langle\text{Mn,S}\rangle$  уровни с энергиями ионизации  $E_I=0,226\text{эВ}$  и  $E_I=0,86\text{эВ}$ .

3. Определены уровни ионизации со значениями  $E_I=0,25\text{эВ}$ ,  $E_2=0,45\text{эВ}$ ,  $E_3=0,55\text{эВ}$  и  $E_4=0,85\text{эВ}$  и область ИК-гашения в интервале  $E_I\approx 0,25\text{эВ}\div 0,52\text{эВ}$  при исследовании фотопроводимости образца  $\text{Si}\langle\text{S}\rangle$ .

4. Установлено, что в интервале  $E\approx 0,25\div 0,55\text{эВ}$  в образце  $\text{Si}\langle\text{S}\rangle$  имеет место отрицательная фотопроводимость в темноте при прямом включении структуры, объясняемая инжекцией носителей заряда.

5. Обнаружен эффект изменения знака носителей заряда при освещении образца КДБ-1, легированного Mn и S при  $T=123\text{K}$  и  $T=198\text{K}$ , обусловленный перезарядкой глубоких уровней, связанных с серой и марганцем.

6. Выявлена существенная доля ИК-составляющей в значениях  $U_{xx}$  и  $i_{kz}$  в образцах монокристаллического кремния с S, Mn и S, что дает основания полагать возможность использования кремния с примесями Mn и S в качестве фотоэлемента.

7. Определена при численном расчете наиболее интенсивная мода  $1056,40\text{ см}^{-1}$  в ИК - колебательном спектре поглощения решетки Si с ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$ , совпадающая с хорошей степенью с наиболее интенсивной модой  $1011,50\text{ см}^{-1}$ , полученной при исследовании колебательного спектра образца  $\text{Si}\langle\text{Mn,S}\rangle$  с помощью FT IR Nicolet iS50.

8. Выявлен размер щели  $E_g = 0,22\text{эВ}$  при численном расчете положения электронов кластера с ячейками  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$ , подтвержденный появлением уровня  $E_I\approx 0,226\text{эВ}$  при исследовании фотопроводимости образца  $\text{Si}\langle\text{Mn,S}\rangle$ , который связан с возбужденным переходом электрона из примесного уровня в зону проводимости.

**SCIENTIFIC COUNCIL FOR AWARDING SCIENTIFIC DEGREES  
DSc.27.06.2017.FM/T.34.01 UNDER PHYSICAL-TECHNICAL INSTITUTE,  
THE INSTITUTE OF ION-PLASMA AND LASER TECHNOLOGIES,  
SAMARKAND STATE UNIVERSITY**

---

**TASHKENT STATE TECHNICAL UNIVERSITY**

**MAVLYANOV ABDULAZIZ SHAVKATOVICH**

**STUDY OF PROPERTIES OF SILICON WITH CLUSTERS OF  
IMPURITY ATOMS**

**01.04.10- Physics of semiconductors**

**ABSTRACT OF THE DISSERTATION OF DOCTOR OF PHILOSOPHY (PhD)  
ON PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES**

**Tashkent – 2018**

**The theme of dissertation of doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences was registered by the Supreme Attestation Commission of the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under № B2017.1. PhD/FM37.**

Dissertation has been prepared at the Tashkent State Technical University.

Abstract of the dissertation is posted in three (uzbek, russian, english (resume) languages) on the website (fti.uz) and on Information and educational portal «Ziyonet» (www.ziyonet.uz).

**Scientific supervisor:** **Iliyev Khalmurat Midjitovich**  
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor

**Official opponents:** **Rahmatov Ahmad Zaynidinovich**  
Doctor of Technical Sciences, Senior Scientific Expert

**Matchanov Nuriddin Azatovich**  
Candidate of Physical and Mathematical Sciences,  
Senior Scientific Expert

**Leading organization:** **National University of Uzbekistan**

Dissertation defense will be held on «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2018 at \_\_\_\_\_ at the meeting of Scientific Council number DSc.27.06.2017.FM/T.34.01 at the Physical-Technical Institute, Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Samarkand State University (address: 100084, Uzbekistan, Tashkent, 2B Bodomzor street. Phone/fax: (+99871) 235-42-91, e-mail: info.fti@uzsci.net).

Dissertation is possible to review in Information-Resource Centre at Physical-Technical Institute (registered under №\_\_\_\_\_). Address: 100084, Uzbekistan, Tashkent, 2B, Bodomzor street. Phone/fax: (+99871) 235-42-91).

Abstract of dissertation sent out on «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2018  
(Registry record № \_\_\_ on «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2018)

**S.A. Bakhramov**

Chairman of scientific council on award of scientific degrees, DSc in physics and mathematics., academician

**A.V. Karimov**

Scientific secretary of scientific council on award of scientific degrees, DSc in physics and mathematics, professor

**I.G. Atabayev**

Chairman of scientific Seminar under Scientific Council on award of scientific degrees, DSc in physics and mathematics, professor

## INTRODUCTION (abstract of the PhD dissertation)

**The aim of research work** is numerical calculation of parameters of the structure with  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  cells and investigation of the photoelectric parameters of single-crystalline silicon doped with Mn and S.

**The objects of the research work** are samples of *p*-type single crystalline silicon KDB-1 (with resistivity  $\rho = 1 \text{ Ohm}\cdot\text{cm}$ ) and the model of the crystal lattice of silicon of a diamond structure with  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  cells.

### **Scientific novelty of the research work:**

samples of single-crystalline silicon with erosion-free surface after high-temperature doping with sulfur were obtained;

ionizing levels, infra-red quenching diapason were revealed in Si samples doped by S. as well as negative photo-conductivity in times of direct connection explained by injection of charge carriers was also revealed;

the phenomenon of sign reversal of charge carriers was detected in silicon samples doped with Mn and S at temperature  $T = 123\text{K}$  and  $T = 198\text{K}$  when illuminated due to charge exchange of deep levels associated with sulfur and manganese;

significant fraction of the infrared diapason in the values of  $U_{oc}$  and  $i_{sc}$  in a single-crystalline silicon sample doped with Mn and S has been revealed, which suggests to a certain extent that it would be possible to apply silicon with MnS clusters as a photocell;

total energy, IR-vibration and electronic spectra, and the spatial position of electrons of the structure with  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  cells were calculated by implementing numerical calculation technique;

a fairly good correlation was found between the value of the vibration mode, the size of the energy gap of the cluster structure with  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$  cells, and experimental data on the study of the vibration spectra and photoconductivity of a sample doped with Mn and S.

### **Implementation of the research results:**

On the basis of computational analysis of parameters of the structure with  $\text{Si}_2\text{Mn}_2\text{S}$ -type cells and stemming from the results of study of photoelectric properties of single-crystalline silicon doped with Mn и S:

The regimes of diffusion doping of silicon with elements of II and VI group were applied in the course of carrying out of the project «Trasporte Mono-y Bipolar en Estructuras Semiconductors» of the Innovation Center of Mexico with the aim to obtain corrosion-free semiconductor structures (Certificate of the Innovation Center of Mexico of 5<sup>th</sup> December of 2017). Application of the scientific results ensured extending of the spectral range of semiconductor photosensitive structures with nanoclusters;

Technological processes of diffusion doping of silicon by multiple step steady rising of temperature were applied by the Joint-Stock Company «FOTON» in the manufacture of semiconductor structures (Reference No. 02-2075 of AK «UZELTEKHSANOAT» from 2017 on October 6). The use of scientific results

made it possible to ensure uniform doping of semiconductor samples with elimination of erosion on the surface;

The technique of forming of diode structure with the required depth of *p-n*-junction by implementing instant cooling method after multiple stage low-temperature diffusion of silicon with impurity atoms, had been availed of in times of implementation of the project YA-FA-F004 «Development of the technology of formation and manufacturing of two coordinate-sensitive detectors on the basis of single-crystalline silicon of large diameter» (Certificate № FTA -02-11/1247 of the Agency of Science and Technology of the Republic of Uzbekistan of 4<sup>th</sup> December of 2017). Application of the scientific results ensured repeatability and stability of the required depth of diffusion.

**The structure and volume of the dissertation.** The dissertation consists of an introduction, four chapters, conclusions, a list of references and an appendix. The text of the thesis is outlined on 115 pages.



**ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙЎХАТИ**  
**СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ**  
**LIST OF PUBLISHED WORKS**

**I бўлим (I часть, part I)**

1. Muminov R.A., Mavlyanov A.Sh., Tursunkulov O.M. Increasing spectral sensitivity of photoelectric converters based on mono-crystalline Si// Гелиотехника, №2, 2013, С. 42–45. [01.00.00., № 1] RG Impact Factor 0.23.

2. Azamatov Z., Akbarova N., Muminov R., Mavlyanov, Redkorechev V., Tukfatullin O., Khusainov I. Multilayer GaAs-Based Heterostructures with Holographic Concentrator for Solar Cells// Materials Sciences and Applications, 2014, 5, P. 871-875. Research Gate Impact Factor 0,44.

3. Bakhadir Khanov M. K., Mavlyanov A., Sodikov U., Khakkulov M. Silicon with Binary Elementary Cells as a Novel Class of Materials for Future Photoenergetics// ISSN 0003\_701X, Applied Solar Energy, 2015, Vol. 51, No. 4, pp. 258–261. © Allerton Press, Inc., 2015. Research Gate Impact Factor 0,65.

4. Мавлянов А.Ш. Повышение эффективности кремниевых фотоэлементов на основе внедрения новых структур// ТошДТУ хабарлари. Тошкент 2015. Махсус сон, С. 79-84. [05.00.00., № 16].

5. Muminov R.A., Mavlyanov A.Sh., R. Rakhimov, Abdukadirov M. Influence of Functional Ceramic Coatings on Efficiency of Solar Cells// International Journal of Advanced Research in Science, Engineering and Technology ISSN: 2350-0328, Vol. 3, Issue 6, June 2016, pp. 2309-2311. SJIFactor: 2016: 4.346.

6. Мавлянов А.Ш., Р. Толипов, С.Т. Гулямова, А.А. Абдурахмонов. Новые материалы для фотоэнергетики с использованием эффекта квантового ограничения// ТошДТУ хабарлари. Т 2016 №3, С. 53-59. [05.00.00., № 16].

7. Мавлянов А.Ш. Фотоэлектрические свойства и вольт-амперная характеристика кремния, легированного селеном // ТошДТУ хабарлари. Тошкент 2017 №3, С. 15-19.

8. Tachilin S.A., Mavlyanov A.Sh., Sheina N.E. Photoelectric properties of silicon doped with sulphur and manganese//Uzbek Journal of Physics. 2017, Vol.19 (№4) [01.00.00., № 5].

**II бўлим (II часть, part II)**

9. Мавлянов А.Ш., Шарофутдинов Н. Модельный расчет параметра элементарной ячейки  $Si_2Zn_2S$  методом функционала электронной плотности DFT. Научно-техническая конференция «Научно-методические проблемы инженерной физики», 8-9 сентября - Ташкент. 2017 -с.65-67.

10. Мавлянов А.Ш. Photoelectric properties of Silicon doped with Sulfur and Manganese. Труды международной конференции «Фундаментальные и прикладные вопросы физики», Ташкент, 2017, с.165-169.

11. Bakhadir Khanov M. K., Mavlyanov A., Koveshnikov S.V., Isamov S.B., Mavlonov G.H., Tuerdi Wumayer. Physical phundamentals of formation of

nanoclusters with controllable parameters as a novel way of obtaining the bulk-structured semiconductor materials. XIII Int. Sc. Conf. «Solid State Physics» 26-28<sup>th</sup> April – Astana. 2016- pp. 228-230.

12. Mavlyanov A.Sh. Study of the possibility of using SiGe solution with a modified lattice parameter as an anode for Li-ion batteries. V Межд. Конф. «Актуальные проблемы молекулярной спектроскопии конденсированных сред», Самарканд, 22-24 сентября 2016, с. 130.

13. Mavlyanov A.Sh. Increasing spectral range of photosensitivity of silicon samples doped with impurity atoms of VI group and transient group elements. Symposium Proceedings IPS 2016, «New Trends of Development Fundamental and Applied Physics», 10-11 November – Tashkent. 2016 – pp.298-299.

14. Бахадырханов М.К., Илиев Х.М., Мавлянов А.Ш., Содиков У.Х., Хаккулов М. Кремний с элементарными ячейками типа  $Si_2A^nB^{8-n}$  как новый и более эффективный материал для фотоэнергетики. «Возобновляемые источники энергии: технологии и установки» 28-29 июня – Ташкент, 2016 – С. 121-122.

15. Мавлянов А.Ш., Содиков У.Х., Хаккулов М. Формирование квантовых точек в решетке кремния с участием примесных атомов». *Ilmiy-amaliy konferensiya «IAK-VIII»* 24-25 апрель – Ташкент. 2015 – с.409-412.

16. Бахадырханов М.К., Илиев Х.М., Мавлянов А.Ш., Содиков У.Х., Хаккулов М. Возможность формирования квантовых точек  $Si_2Mn^{2-}A^{1/2+}$  в решетке кремния. 6-Межд. конф. «Кристаллофизика и деформационное поведение перспективных материалов» 26-28 мая – М., РФ. 2015 – С.50.

17. Бахадырханов М.К., Азизов М.К., Мавлянов А.Ш. Прибор для непрерывного измерения и контроля температуры. Шестая международная конференция «Кристаллофизика и деформационное поведение перспективных материалов» 26-28 мая – М., РФ. 2015 – С.52.

18. Бахадырханов М.К., Илиев Х.М., Мавлянов А.Ш., Содиков У.Х., Мавлонов Г.Х., Сайтов Э.Б., Саттаров О.Э., Абдурахманов Б. Физические основы формирования нанокластеров примесных атомов в полупроводниках. X Конф. по актуальным проблемам физики, материаловедения и диагностики кремния, нанометровых структур и приборов на его основе «Кремний-2014», Иркутск, РФ. 2014 – С.74.

19. Мавлянов А.Ш., Содиков У.Х. Безэрозионная технология диффузии элементов VI группы в кремний. «Яримутказгичлар физикасининг долзарб муаммолари» 22 ноябрь – Тошкент.2014- с. 78-80.

20. Бахадырханов М.К., Сайтов Э.Б., Абдурахманов Б., Мавлянов А.Ш., Валиев С.А. Самоорганизация кластеров примесных атомов в полупроводниках. XII Int. Sc. Conf. «Solid State Physics» 25-27 June – Astana. 2014, с.44-46.

21. Бахадырханов М.К., Мавлянов А.Ш., Содиков У.Х. Кремний с бинарными нанокластерами примесных атомов – как новый класс материалов для фотоэнергетики. III Межд.конф. по оптическим и фотоэлектрическим явлениям в полупроводниковых микро- и наноструктурах 14-15 ноября – Фергана. 2014 – с. 51-54.

Авторефератнинг ўзбек, рус ва инглиз тилларидаги нусхалари  
«Тил ва адабиёт таълими» таъририятида таъхирдан ўтказилди.  
(19.10.2017 йил)

Босишга рухсат этилди: \_\_\_\_\_ 2018 йил.  
Бичими 60x44 <sup>1</sup>/<sub>16</sub>, «Times New Roman»  
гарнитурда рақамли босма усулида босилди.  
Шартли босма табағи 2,3. Адади: 100. Буюртма: № \_\_\_\_\_.

Ўзбекистон Республикаси ИИВ Академияси,  
100197, Тошкент, Интизор кўчаси, 68.

«АКАДЕМИЯ НОШИРЛИК МАРКАЗИ»  
Давлат унитар корхонасида чоп этилди.